

TRABAJO DE FIN DE GRADO

Grado en Ingeniería Química

**ESTUDIO Y DESARROLLO DE SISTEMAS MULTICAPA DE
POLÍMEROS CONDUCTORES CON APLICACIÓN COMO
SENSOR DE NEUROTRANSMISORES.**



Memoria y Anexos

Autor: Eukene LARRAÑAGA VAN SCHENDEL
Director: Núria BORRÀS CRISTÒFOL
Convocatoria: Enero 2020

Resumen

El proyecto que en estas páginas se presenta nace en el seno del grupo de investigación IMEM de l'Escola d'Enginyeria de Barcelona Est (EEBE), y lo hace con el objetivo de estudiar la utilización de polímeros conductores para la creación de sensores multicapa con interfase nanoperforada para la detección de neurotransmisores, concretamente la dopamina y la serotonina.

Durante el desarrollo de este trabajo, se estudian específicamente dos sensores diferentes, los cuales están compuestos por sistemas multicapa de poli(3,4-etilendioxitiofeno) (PEDOT), poli(N-metilpirrol) (PNMPy) y un copolímero conformado por la mezcla de los anteriores. La disposición es la siguiente:

- Sensor 1: PEDOT, PNMPy, capa nanoperforada, PNMPy y PEDOT.
- Sensor 2: PEDOT, COPOLIMERO, capa nanoperforada, COPOLIMERO y PEDOT.

El estudio comienza con una primera fase centrada en la preparación y caracterización de films de polímero conductor PEDOT y copolímero PEDOT-PNMPy con interfase nanoperforada en electrodos de acero AISI, a modo de estudio previo del copolímero.

A continuación, una segunda fase se focaliza en la generación y preparación de los sensores multicapa antes mencionados, donde además de producir el sensor, se realizan ensayos para su correcto funcionamiento.

Finalmente, una tercera fase aborda la detección de los neurotransmisores dopamina y serotonina con los dos sensores multicapa con interfase nanoperforada generados. Esto se realiza tanto de manera aislada para cada neurotransmisor, como de manera simultánea. Asimismo, se estudian los límites de detección de estos sensores.

Acabadas todas estas fases, se obtienen resultados viables en la detección de la dopamina dentro del rango de concentraciones de 0-100 μM . Para el caso de la serotonina, y a pesar de realizar una revisión y modificación del sensor inicial, tan solo se obtienen resultados viables en el rango 0-50 μM . Por esta razón, se considera limitada la detección de la serotonina y por ende, la detección simultánea de ambos neurotransmisores.

Resum

El projecte que en aquestes pàgines es presenta neix en el si del grup d'investigació IMEM de l'Escola d'Enginyeria de Barcelona Est (EEBE), i ho fa amb l'objectiu d'estudiar la utilització de polímers conductors per a la creació de sensors multicapa amb interfase nanoperforada per a la detecció de neurotransmissors, concretament la dopamina i la serotonina.

Durant el desenvolupament d'aquest treball, s'estudien específicament dos sensors diferents, els quals son compostat per sistemes multicapa de poli(3,4-etilendioxitiofeno) (PEDOT), poli(N-metilpirrol) (PNMPy) i un copolímer conformat per una barreja dels anteriors, la disposició es següent:

- Sensor 1: PEDOT, PNMPy, capa nanoperforada, PNMPy i PEDOT.
- Sensor 2: PEDOT, COPOLIMERO, capa nanoperforada, COPOLIMERO i PEDOT.

L'estudi comença amb una primera fase centrada en la preparació i caracterització de films de polímer conductor PEDOT i copolímer PEDOT-PNMPy amb interfase nanoperforada en elèctrodes d'acer AISI, a mode d'estudi previ del copolímer.

A continuació, una segona fase es focalitza en la generació i preparació dels sensors multicapa abans mencionats, on a més a més de produir el sensor, es realitzen assajos pel seu correcte funcionament.

Finalment, una tercera fase aborda la detecció dels neurotransmissors dopamina i serotonina amb els dos sensors multicapa amb interfase nanoperforada generats. Això es realitza tant de manera aïllada per a cada neurotransmissor, com de manera simultània. De la matèria manera, s'estudien els límits de detecció d'aquests sensors.

Acabades totes aquestes fases, s'obtenen resultats viables en la detecció de la dopamina dins del rang 0-100 μM . Per el cas de la serotonina, i tot i haver realitzat una revisió i modificació del sensor inicial, tan sols s'obtenen resultats viables en el rang 0-50 μM . Per aquest motiu, es considera limitada la detecció de la serotonina i, per tant, la detecció simultània d'ambdós neurotramissors.

Abstract

The work presented in these pages arises from the bosom of the research group IMEM from l' Escola d'Enginyeria de Barcelona Est (EEBE), and does so with the goal of studying the utilization of conductive polymers for the creation of multilayer sensors with nanoperforated interface for the detection of neurotransmitters, in this case dopamine and serotonin.

During the execution of this work, two specific sensors are studied, which are formed of poly(3,4-ethylenedioxythiophene), poly(N-methylpyrrole) and a copolymer formed of the mixture of the before mentioned, generated the following way:

- Sensor 1: PEDOT, PNMPy, nanoperforated interface, PNMPy and PEDOT.
- Sensor 2: PEDOT, COPOLIMERO, nanoperforated interface, COPOLIMERO and PEDOT.

The study begins with a first phase centered in the preparation and characterization of films of conductive PEDOT polymer and copolymer PEDOD-PNMPy with nanoperforated interface in AISI steel electrodes, with the intention of previous study of the copolymer.

Next to that, a second phase is focalized in the generation and preparation of the multilayer sensors before mentioned, where besides producing the sensor, essays are being made for its right functioning.

Finally, a third phase tackles the detection of the neurotransmitters dopamine and serotonin with the two multilayer sensors with nanoperforated interface generated. This is done both in an isolated way for every neurotransmitter, as in a simultaneous way. In addition, limits of detection of these sensors are studied.

Once finished all these phases, viable results are obtained in the detection of dopamine between the range 0-100 μM . For the case of the serotonin, and despite of having performed a revision and modification of the initial sensor, only viable results are obtained between the range 0-50 μM . For this reason, the detection of the serotonin is considered limited, and thus, the simultaneous detection of both neurotransmitters.

Agradecimientos

A Núria Borràs por su conocimiento, su apoyo y su infinita paciencia, que me permitieron ponerle punto y final a esta etapa de mi vida. A los compañeros del laboratorio IMEM, quienes hacían agradables las eternas horas de ensayos y trataban de ayudar en los momentos críticos.

A mi familia, que cerca o lejos, me han guiado y apoyado de manera incondicional. En especial a mis hermanos, son los dos pilares fundamentales de mi vida.

A él que donde esté, seguro está sonriendo.

A mi pareja Tomás Martín, por siempre estar allí.

A mis amigos y aquellas personas que me han distraído e impedido dedicar más tiempo a este trabajo por buenos motivos.

Glosario

5-HT	Serotonina.
A	Amperios.
CA	Cronoamperometría. En inglés Chronoamperometry.
CE	Contra-electrodo.
COP	Copolímero conformado por poli(3,4-etilendioxitiofeno) (PEDOT) y poli(N-metilpirrol) (PNMPy).
CV	Ciclovoltamperometría. En inglés Cyclicvoltammetry.
DA	Dopamina.
EDOT	3,4-etilendioxitiofeno.
Glassy carbon	Carbono vítreo en inglés.
IMEM	Innovación de los materiales. Grupo de investigación de la EEBE-UPC.
LEA	Pérdida de electroactividad. Proveniente de las siglas en inglés de Less Of Electroactivity.
NaCl	Cloruro de sodio conocida como sal común.
NMPy	N-metilpirrol.
PBS	Tampón fosfato salino. Proveniente de las siglas en inglés de Phosphate Buffered Saline.
PEDOT	Poli(3,4-etilendioxitiofeno).
SC	Capacitancia específica (F/g).
RE	Electrodo de referencia. Proveniente de las siglas en inglés de Reference Electrodo.
V	Voltios.

WE Electrodo de trabajo. Proveniente de las siglas en inglés de Working Electrodo.

Lista de tablas

Tabla 1: Resumen de las características de las multicapas a generar en los electrodos.	29
Tabla 2: Resumen de las características de las multicapas a generar en los electrodos.	32
Tabla 3: Adiciones correspondientes a la detección de dopamina.	34
Tabla 4: Adiciones correspondientes a la detección de serotonina.	35
Tabla 5: Adiciones correspondientes de dopamina y serotonina para la detección simultánea de ambos neurotransmisores.	35
Tabla 6: Adiciones correspondientes al límite de detección de dopamina.	36
Tabla 7: Adiciones correspondientes a la detección de serotonina.	36
Tabla 8: Resumen de los resultados de LEA y SC en el ciclo 2 y 5 para cada film.	39
Tabla 9: Resumen de la eliminación correcta de las sustancias del proyecto	69
Tabla 10: Coste de la mano de obra.	73
Tabla 11: Costes de los reactivos.	73
Tabla 12: Costes de los materiales.	74
Tabla 13: Coste instrumentos electrónicos del laboratorio.	75
Tabla 14: Resumen de los diferentes costes del proyecto.	75

Lista de figuras

Figura 1: Polímeros: a) Sistema amorfo. B) Sistema semicristalino. C) Sistema cristalino.	6
Figura 2: Polimerización por adición.	7
Figura 3: Polimerización por condensación.	7
Figura 4: Molécula de PEDOT.	10
Figura 5: Molécula de PNMPy.	11
Figura 6: Molécula de dopamina.	12
Figura 7: Molécula de la serotonina.	12
Figura 8: Clasificación de las técnicas electroquímicas.	13
Figura 9: Diagrama de las partes de una celda electrolítica.	14
Figura 10: a) Cambio del potencial en función al tiempo. B) Curva corriente/potencial resultante de una ciclovoltamperometría.	15
Figura 11: Ciclovoltamperometría de control de la solución EDOT utilizada.	16
Figura 12: Variación del potencial durante la cronoamperometría.	17
Figura 13: Molécula de la acetona.	18
Figura 14: Molécula del acetonitrilo.	18
Figura 15: Molécula de agua.	19
Figura 16: Molécula de dihidrógeno fosfato de potasio.	20
Figura 17: Molécula de EDOT.	21

Figura 18: Molécula de etanol. _____	21
Figura 20: Molécula de NMPy. _____	22
Figura 22: Conexión de cada instrumento durante la realización del sensor del proyecto.	24
Figura 23: Potenciostato/Galvanostato utilizado en el proyecto de la marca AUTOLAB modelo PGSTA 204. _____	26
Figura 24: Electrodo con la generación resultante _____	31
Figura 25: Film 8. Capas del copolímero a una carga de 0,7 y interfase nanoperforada cuarteada.	40
Figura 26: Evolución de la pérdida de electroactividad con respecto al número de ciclos. _____	41
Figura 27: Comparación entre SC de los ciclos 2 y 50. _____	42
Figura 28: Gráfico de la carga acumulada con respecto a los ciclos ensayados _____	42
Figura 29: Cronopotenciometría a 1 mA con respecto al tiempo (t=1000) _____	43
Figura 30: Gráfico de detección de dopamina en el rango de 0-35 μ M en el sensor 1. _____	44
Figura 31: Gráfico de detección de dopamina en el rango de 40-100 μ M en el sensor 1. _____	44
Figura 32: Intensidad de pico con respecto a la concentración del sensor conformado por PEDOT y PNMPy. _____	45
Figura 33: Representación gráfica de la derivada de la intensidad con respecto al tiempo para el límite de detección de dopamina en el sensor conformado por PEDOT y PNMPy.. _____	46
Figura 34: Porcentaje de pérdida de electroactividad del sensor 1 con respecto al número de ciclo en la detección de dopamina. _____	46
Figura 35: Gráfico de detección de dopamina en el rango de 0-35 μ M en el sensor 2. _____	47
Figura 36: Gráfico de detección de dopamina en el rango de 40-100 μ M en el sensor 2. _____	47

Figura 37: Intensidad de pico con respecto a la concentración del sensor 2. _____	48
Figura 38: Representación gráfica de la derivada de la intensidad con respecto al tiempo para el límite de detección de dopamina en el sensor conformado por el copolímero. _____	49
Figura 39: Porcentaje de pérdida de electroactividad del sensor 2 con respecto al número de ciclo en la detección de dopamina.. _____	49
Figura 40: Gráfico intensidad versus potencial para la detección de serotonina en el rango de 0-35 μM en el sensor 1. _____	50
Figura 41: Gráfico intensidad versus potencial para la detección de serotonina en el rango de 40-100 μM en el sensor 1. _____	51
Figura 42: Intensidad de pico con respecto a la concentración del sensor 1. _____	51
Figura 43: Intensidad de pico con respecto a la concentración de los sensores 1 original y nueva versión. _____	52
Figura 44: Modelo de regresión con respecto a la intensidad versus la concentración de serotonina de la nueva versión del sensor 1. _____	53
Figura 45: Representación gráfica de la derivada de la intensidad con respecto al tiempo para el límite de detección de concentración mínima de serotonina en el sensor conformado por PNMPy.54	
Figura 46: Representación gráfica de la derivada de la intensidad con respecto al tiempo para el límite de detección de concentración mínima de serotonina en el sensor conformado por PNMPy.54	
Figura 47: Porcentaje de pérdida de electroactividad del sensor 1 con respecto al número de ciclo en la detección de serotonina. _____	55
Figura 48: Gráfico intensidad vs potencial para la detección de serotonina en el rango de 0-35 μM en el sensor 2. _____	56
Figura 49: Gráfico intensidad vs potencial para la detección de serotonina en el rango de 40-100 μM en el sensor 2. _____	56

- Figura 50: Intensidad de pico con respecto a la concentración del sensor 2. _____ 57
- Figura 51: Intensidad de pico con respecto a la concentración de los sensores 2 original y nueva versión.
_____ 58
- Figura 52: Intensidad de pico con respecto a la concentración del sensor 2 en el rango de detección.
_____ 58
- Figura 53: Representación gráfica de la derivada de la intensidad con respecto al tiempo para el límite de detección de concentración mínima de serotonina en el sensor conformado el copolímero.
_____ 59
- Figura 54: Representación gráfica de la derivada de la intensidad con respecto al tiempo para el límite de detección de concentración mínima de serotonina en el sensor conformado por el copolímero.
_____ 59
- Figura 55: Porcentaje de pérdida de electroactividad del sensor 2 con respecto al número de ciclo en la detección de serotonina. _____ 60
- Figura 56: Gráfico intensidad vs potencial para la detección simultánea en el rango de 0-45 μM en el sensor 1. _____ 61
- Figura 57: Gráfico intensidad vs potencial para la detección simultánea en el rango de 0-50 μM en el sensor 2. _____ 62
- Figura 58: Intensidad de pico con respecto a la concentración del sensor 1 conformado por PEDOT-PNMPy en el rango de detección. _____ 63
- Figura 59: Intensidad de pico con respecto a la concentración del sensor 1 conformado por PEDOT-Copolímero en el rango de detección. _____ 64
- Figura 60: Gráfico comparativo de las intensidades de pico con respecto a las concentraciones del sensor 1 conformado por PEDOT-PNMPy en el rango de detección.. _____ 65
- Figura 61: Gráfico comparativo de las intensidades de pico con respecto a las concentraciones del sensor 2 conformado por PEDOT-Copolímero en el rango de detección. _____ 66

Figura 62: Comparación de las intensidades de pico con respecto a las concentraciones del sensor 2 conformado por PEDOT-Copolímero en el rango de detección. _____ 67

Figura 63: Comparación de las intensidades de pico con respecto a las concentraciones del sensor 2 conformado por PEDOT-Copolímero en el rango de detección. _____ 68

Índice

RESUMEN	I
RESUM	II
ABSTRACT	III
AGRADECIMIENTOS	IV
GLOSARIO	V
LISTA DE TABLAS	VII
LISTA DE FIGURAS	VIII
1. PREFACIO	1
Origen del trabajo	1
Motivación	1
Requerimientos previos	2
2. INTRODUCCIÓN	3
Objetivos del trabajo	3
Alcance del trabajo	3
3. FUNDAMENTO TEÓRICO	4
Los polímeros	4
3.1.1. Estructura de los polímeros	4
3.1.2. Polimerización y electropolimerización.	6
3.1.3. Propiedades	8
Conductividad eléctrica	9
3.1.4. Efecto dopaje	9
3.1.5. Pérdida de electroactividad (LEA)	10
3.1.6. Capacitancia específica (SC)	10
Sustancias estudiadas	10
3.1.7. Poli(3,4-etilendioxitiofeno) (PEDOT)	10
3.1.8. Poli(N-metilpirrol) (PNMPy)	11
3.1.9. Copolímero PEDOT-PNMPy	11
3.1.10. Neurotransmisores	11
4. TÉCNICAS DE CARACTERIZACIÓN	13

Celda electroquímica	14
Ciclovoltamperometría.....	14
4.1.1. Ciclovoltamperometría de control.....	15
Cronopotenciometría	16
Cronoamperometría.....	16
5. MATERIALES Y REACTIVOS	18
Reactivos	18
5.1.1. Acetona.....	18
5.1.2. Acetonitrilo	18
5.1.3. Agua desionizada.....	19
5.1.4. Agua MilliQ	19
5.1.5. Cloruro de potasio.....	20
5.1.6. Cloruro de sodio	20
5.1.7. Dihidrogenofosfato de potasio	20
5.1.8. 3,4-etilendioxitiofeno (EDOT)	21
5.1.9. Etanol.....	21
5.1.10. Fosfato disódico.....	22
5.1.11. Nitrógeno gas	22
5.1.12. N-metilpirrol (NMPy).....	22
5.1.13. Perclorato de litio	23
Materiales e instrumentos	23
5.1.14. Celda electrolítica: Celda abierta	24
5.1.15. Contra electrodo (CE).....	24
5.1.16. Electrodo de referencia (RE)	24
5.1.17. Electrodo de trabajo (WE).....	24
5.1.18. Instrumentos de laboratorio.....	25
5.1.19. Ordenador	25
5.1.20. Potenciostato – Galvanostato (Autolab)	25
Programas computacionales	26
5.1.21. Programa NOVA 2.1.	26
6. MÉTODO EXPERIMENTAL	27
Preparación de las soluciones	27
6.1.1. Soluciones electrolíticas	28
6.1.2. Soluciones stock	28
Preparación y caracterización de la multicapa PEDOT y copolímero PEDOT-PNMPy ...	29

6.1.3. Generación de la multicapa PEDOT y copolímero PEDOT-PNMPy en el electrodo de acero.	29
6.1.4. Caracterización de la multicapa PEDOT y copolímero PEDOT-PNMPy	31
Preparación del electrodo de multicapa	32
6.1.5. Generación de las multicapas de polímeros en el electrodo de <i>Glassy Carbon</i> . 32	
Detección de los neurotransmisores	34
6.1.6. Detección de los neurotransmisores de manera individual:	34
6.1.7. Detección de los neurotransmisores de manera simultánea:.....	35
6.1.8. Límites de detección	35
Programas NOVA 2.1	36
6.1.9. Ciclovoltamperometría de control	36
6.1.10. Generación de la capa de polímero	37
6.1.11. Ciclovoltamperometria de caracterización/envejecimiento (CV)	37
6.1.12. Cronopotenciometria (CP).....	37
6.1.13. Ciclovoltamperometria de detección.....	38
7. ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS	39
Estudio de la multicapa PEDOT y copolímero PEDOT-PNMPy con interfase nanoperforada	39
Detección de los neurotransmisores con los sensores multicapa	43
7.1.1. Detección de la dopamina	44
7.1.2. Detección de la serotonina	50
7.1.3. Detección simultánea de los neurotransmisores	60
8. ANÁLISIS DEL IMPACTO AMBIENTAL	69
CONCLUSIONES	71
ANÁLISIS ECONÓMICO	73
BIBLIOGRAFÍA	77
ANEXO A. FICHAS DE SEGURIDAD.	83
A.1. Acetona	83
A.2. Acetonitrilo	85
A.3. Cloruro de potasio	87
A.4. Cloruro de sodio.....	89
A.5. Dihidrógenofosfato de potasio.....	92
A.6. 3,4-etilendioxitiofeno	94

A.7. Etanol.....	102
A.8. Fosfato disódico.....	104
A.9. Nitrógeno.....	106
A.10. N-metilpirrol	108
A.11. Perclorato de litio	121

1. Prefacio

Origen del trabajo

Durante años se pensaba que todos los polímeros que existían eran malos conductores de la electricidad y por esta razón el desarrollo científico de las propiedades eléctricas sobre ellos era escaso. No fue hasta 1977 que los profesores Alan G. MacDiarmid, Alan J. Heeger y Hideki Shirakawa descubrieron accidentalmente que los polímeros conducían electricidad en vez de frenarla. Esta contribución fue importante a la hora del desarrollo en el campo en los últimos años.

Desde entonces, se ha ampliado la frontera sobre la utilización de polímeros, con empleos nunca imaginables antes del descubrimiento como: sensores químicos, baterías orgánicas, aditivos anticorrosivos, entre otros. Además, se desarrollan nuevos polímeros que en un único material combina buenas propiedades mecánicas con una buena capacidad eléctrica, como por ejemplo el poli(3,4-etilendioxitiofeno) (PEDOT), poli(N-metilpirrol), entre otros [1].

Hoy en día se considera que los polímeros conductores tienen grandes aplicaciones en el campo de la biomédica y biomedicina, con respecto de la creación de dispositivos analíticos con interacciones específicas y selectivas como lo son sistemas de liberación de fármacos, biosensores, ingeniería de tejidos, entre otros [2].

Motivación

El grupo de investigación IMEM de l'Escola d'Enginyeria de Barcelona Est (EEBE) centra una de sus actividades en el estudio y transferencia de tecnología en el desarrollo de nuevos materiales. La investigación de polímeros micro y nano estructurados se basa tanto a nivel experimental como mediante técnicas de simulación computacional [3].

Entre los resultados, destacan estudios de polímeros para el desarrollo de baterías orgánicas, investigaciones sobre las propiedades antibacterianas del PEDOT, trabajos sobre la viabilidad de materiales químicos como cemento óseo, entre otros [4].

Actualmente, son varias las líneas de investigación abiertas. Una de ellas es la de el uso de polímeros conductores para la creación de sensores, pues se considera que, en caso de éxito, esto podría tener una gran repercusión y generar una gran ventaja competitiva en el campo de la biomedicina y biotecnología.



Así, este trabajo pretende colaborar en esta línea de investigación y ayudar a fijar las próximas metas.

Requerimientos previos

Para la realización de este proyecto se toma como primera referencia el trabajo realizado por los profesores e investigadores Georgina Fabregat, Elaine Armelin y Carlos Alemán, cuyo objetivo principal es la utilización de polímeros conductores formados en una multicapa en nanopartículas de oro como detectores selectivos de dopamina [5].

Es una de las primeras investigaciones del grupo INEM en buscar polímeros conductores en detectar un neurotransmisor.

Como segunda referencia es el proyecto final de grado ejecutado por Marc Vendrell, trata de la preparación de un sensor tricapa conformado por PEDOT y PNMPy para la detección de los neurotransmisores dopamina y serotonina [6].

La tercera referencia importante es el informe de prácticas de Jeanfran Castro, que realiza el primer estudio de propiedades eléctricas y mecánicas de un electrodo multicapa con interface perforada de los polímeros utilizados en el proyecto mencionado anteriormente de Marc Vendrell [7].

Con respecto a la incorporación del copolímero formado por PEDOT-PNMPy se toma como trabajo importante el estudio realizado por el Departamento de Ingeniería Química de la ETSEIB y la Unidad de Química Industrial de la EUETIB, donde se comienza a realizar investigaciones sobre el comportamiento eléctrico de este copolímero y se demuestra la capacidad de ser un buen polímero conductor [8].

Por último, otro punto de partida importante es la realización del estudio de los profesores Núria Borràs, Francesc Estrany y Carlos Alemán que trata sobre la influencia de creación de nanoperforaciones entre multicapas de polímeros conductores [9].

Con todo, el presente trabajo elabora bajo criterios similares, las diferentes pruebas y actuaciones realizadas en las investigaciones comentadas anteriormente.

2. Introducción

Objetivos del trabajo

En la realización del proyecto se establecen los siguientes objetivos:

- Preparar sistemas multicapa de los polímeros conductores PEDOT; PNMPy y copolímero PEDOT-PNMPy mediante cronoamperometría y generar interfaces nanoperforadas mediante la técnica adecuada.
- Caracterizar todos los sistemas multicapa preparados mediante técnicas amperométricas, para determinar la pérdida de electroestabilidad y capacitancia específica.
- Generar y condicionar los dos diferentes sensores de multicapa con interfase nanoperforada PEDOT combinado con PNMPy y PEDOT combinado con el copolímero, sobre los electrodos de trabajo de carbono vítreo.
- Obtener los datos experimentales de los diferentes tipos de sensores generados con respecto a la detección de los neurotransmisores en las soluciones analizadas.
- Procesar los datos experimentales, para lograr realizar un modelo de regresión lineal y encontrar los límites de detección de estos sensores.
- Comprobar la viabilidad de estos sensores con respecto a los estudios realizados en el trabajo.

Alcance del trabajo

Dada la naturaleza de este trabajo, y teniendo en cuenta que este se enmarca en una línea de investigación mucho más amplia, éste se limitará a estudiar la viabilidad de un sensor basado en la combinación de diferentes polímeros conductores, para la detección simultánea de dopamina y serotonina.

Sí es cierto que el hecho de estudiar el comportamiento del copolímero de diferentes espesores y diferentes composiciones de los sensores permitirá extrapolar ciertas conclusiones a otros campos de la biomédica y la biotecnología.

3. Fundamento teórico

Los polímeros

La palabra polímero proviene de un término griego que significa constituido o compuesto por muchos. Se define como el elemento formado por la unión de moléculas más pequeñas llamadas monómeros. El término polímero engloba una extensa variedad de materiales tanto naturales como sintéticos, se pueden incluir sustancias tan conocidas como la celulosa, el almidón, proteínas, las pieles, las lanas, el algodón, plásticos, cauchos, pinturas, entre otros.

3.1.1. Estructura de los polímeros

Los polímeros se pueden clasificar según su estructura química y su estructura física. La primera se refiere a la construcción de la molécula individual y la segunda al ordenamiento de unas moléculas respecto a otras [10].

3.1.1.1. Estructura química

3.1.1.1.1 Tipos de átomos en la cadena principal y sustituyentes

Los átomos de carbono que constituyen la cadena principal de polímeros tienen una configuración sp^3 , por esta razón se disponen de forma tetraédrica en torno de cada átomo de carbono y el ángulo de enlace de cada carbono es aproximadamente de 109° .

No obstante, las fuerzas responsables de cohesión entre cadenas están condicionadas por la polaridad y el volumen de los átomos y sustituyentes, determinando así las propiedades propias del polímero como lo son la temperatura de transición vítrea, la flexibilidad, la temperatura de fusión, la capacidad de cristalización con otros polímeros, entre otros.

3.1.1.1.2 Uniones entre monómeros

Dependiendo del tipo de polimerización que se lleve a cabo se unen de una forma u otra los monómeros.

Aquellos polímeros que polimericen a través del doble enlace de carbono y otro elemento son menos estables que los producidos por las uniones normales de los dobles enlaces de carbono-carbono. Estas uniones tienen importancia en la estabilidad térmica del polímero.

La unión normal entre monómeros terminales es entre la cabeza de uno y la cola del otro, pero también existen uniones cabeza-cabeza o cola-cola llamados enlaces lábiles [10].

3.1.1.1.3 Composición del polímero

1. Homopolímero

Consiste en polímeros formados con un solo tipo de monómero (A). Se trata de una cadena homogénea.



2. Copolímeros

Se trata de polímeros formados con dos tipos de monómeros distintos (A y B) y se pueden encontrar hasta con tres tipos de monómeros. Sus unidades estructurales A y B, se pueden colocar en orden distinto a lo largo de la cadena polimérica, obteniéndose distintos tipos de polímeros.

- Copolímeros al azar: —ABBABBBAAABABB—
- Copolímeros alternantes: —ABABABABABABAB—

Ambos son copolímeros lineales, pero en primer caso, se trata de un copolímero que los dos tipos de monómeros están completamente formados dentro de la cadena polimérica al azar. Mientras en el segundo caso, se encuentra de forma alternada, es decir, después de un monómero de tipo A continua un manómetro B y en seguida a este vuelve a encontrarse el monómero A.

- Copolímeros de bloque: —AAAAAABBBBBBB—

Este caso, se trata de una cadena polimérica que las unidades de monómeros forman bloques, es decir existe la predominancia de un tipo de monómero.

- Copolímeros de injerto:

También se puede encontrar el copolímero en bloque de manera ramificada, siendo la unidad estructural de la cadena principal de tipo A y la ramificación de tipo B [11].

- 3. Cadenas bifuncionales y trifuncionales: consisten en cadenas poliméricas con dos o tres enlaces activos que permiten unirse a otros monómeros.

3.1.1.1.4 Ramificación y entrecruzamiento



A la hora de realizar la polimerización no existen reacciones secundarias el resultado son polímeros lineales, si ocurren estas reacciones secundarias se pueden formar ramificaciones cortas o largas. De esto dependen algunas propiedades y varían considerablemente según la longitud de la ramificación.

Cuando los polímeros se unen a otros vecinos de igual o diferente naturaleza se llama entrecruzamiento, y se logra obtener una red tridimensional que es insoluble y no se puede fundir.

3.1.1.1.5 Configuración

Se trata de la ordenación en el espacio de los sustituyentes con respecto al átomo que se encuentra unido. Existen tres tipos:

- Isotáctica: Los sustituyentes se encuentran por encima o por debajo del plano de la cadena principal.
- Sindiotáctica: Los sustituyentes quedan alternativamente por encima o por debajo del plano.
- Atáctica: corresponde a una secuencia al azar de los sustituyentes con respecto a la cadena principal.

3.1.1.2. Estructura física

3.1.1.2.1 Estado amorfo o cristalino

Los términos amorfo y cristalino se refieren al orden de las moléculas en las diferentes regiones de los polímeros. Cristalinos son los polímeros que tienen un orden en la agrupación de los monómeros mientras que los amorfos son lo contrario, es decir, los monómeros se encuentran desordenados.

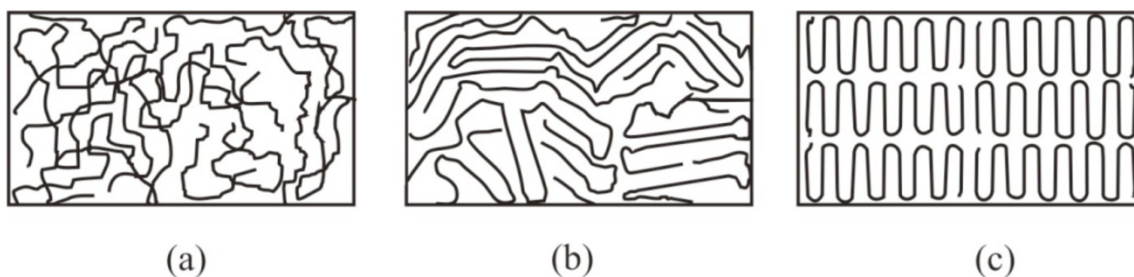


Figura 1: Polímeros: a) Sistema amorfo. B) Sistema semicristalino. C) Sistema cristalino. [Fuente: [10]]

3.1.2. Polimerización y electropolimerización.

Existen dos categorías en la formación, polímeros formados por medio de reacciones o por crecimiento.

Para la formación de polímeros por medio de reacciones, existen dos existen dos diferentes vías:

- Polimerizaciones de adición a un doble enlace

Para que ocurra esta formación se precisa la existencia en el monómero de un doble enlace, generalmente entre dos carbonos. La reacción comienza por la rotura de un enlace carbono-carbono con ayuda de algún iniciador y dando lugar a la aparición de un radical, un anión o un catión, que es por donde continuará la reacción. La molécula obtenida puede representarse como:

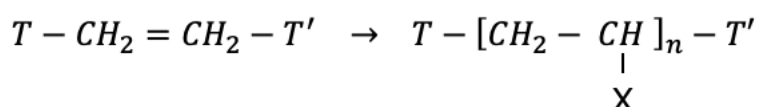


Figura 2: Polimerización por adición. [Fuente: propia]

Donde T y T' representan los grupos finales, que pueden provenir de los distintos reactivos que se encontraban en el matraz de reacción.

- Polimerizaciones por condensación de monómeros multifuncionales

Se trata de emplear monómeros multifuncionales en los que existan al menos dos grupos funcionales distintos, capaces de reaccionar entre si mediante reacciones, dando lugar el polímero correspondiente. Un ejemplo lo constituye la reacción del ácido sebácico (un diácido) con el etilenglicol (un dialcohol):

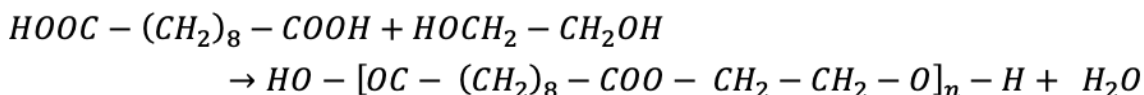


Figura 3: Polimerización por condensación. [Fuente: propia]

Donde el resultado de la reacción forma un poliéster y una molécula de agua.

En ambas polimerizaciones la n indica cuantas veces se repite esa unidad a lo largo de la cadena, determina el grado de polimerización y por consiguiente está ligado al peso molecular y dependiendo del tamaño de la molécula se pueden despreciar la contribución de los grupos finales [11].

Para la formación de polímeros por crecimiento, existen dos existen dos diferentes vías:

- Polimerización por etapas

Se define como reacciones en las que tienen lugar, de forma repetida, clásicos procesos de condensación entre dos grupos funcionales distintos, para dar lugar a otro nuevo, con la eliminación de moléculas pequeñas.

- Polimerización por crecimiento

Es generalmente el resultado de la apertura del doble enlace del carbono e interaccionando con el extremo reactivo de otra cadena provocando el crecimiento del polímero [11].

La electropolimerización trata de una técnica de polimerización rápida que se hace pasar el flujo de una corriente eléctrica anódica a través de una disolución que contiene el monómero. El resultado es la generación el polímero queda depositado en el electrodo [12].

3.1.3. Propiedades

A pesar de la extensa variedad de polímeros con respecto a su estructura y composición, existen algunas propiedades comunes entre todos ellos y los distinguen de otros materiales.

La *densidad* de estos materiales es relativamente baja. Se debe fundamentalmente a que los átomos que los componen son ligeros y la distancia que existe entre átomos es relativamente grande. Una densidad baja permite materiales fáciles de manejar y diseños donde el peso de las piezas es una limitación.

El valor de la *conductividad térmica* es sumamente pequeño. Se debe a la ausencia de electrones libres en el material. A pesar que es un inconveniente para la fabricación y la síntesis de los polímeros que esta propiedad sea baja, para la su utilización es una ventaja ya que la funciona como aislante térmico.

Al igual que la conductividad térmica como norma general los polímeros presentan resistencias muy elevadas, pero existen algunos de ellos que se distinguen por su alta *conductividad eléctrica*, llamados polímeros conductores. Ya que en ellos existe un mecanismo que se basa en el dopaje y la facilidad de movimiento de los electrones a través de los enlaces covalentes en sus largas cadenas.

Con respecto a sus *propiedades ópticas*, esta fuertemente influenciada por la cristalinidad del material. Ya que si se trata de polímeros amorfos son transparentes no causa una difracción de la luz importante, pero si se trata de polímeros cristalinos son opacos y causa dispersan la luz, evitando así su libre transmisión.

Por último, la *resistencia química* también viene influenciada por la cristalinidad del polímero. El cual, dependiendo del grado de cristalinidad varía, es decir, mientras más forma amorfa más frágil y a mayor forma cristalina más dúctil. [10]

Conductividad eléctrica

La conductiva eléctrica (σ) es la capacidad de un material para permitir el paso de los electrones a través de él, es decir, la disposición que existe en el material para transportar electrones y viene condicionada por la molécula de la sustancia y estructura atómica del material. Las unidades de la conductividad eléctrica son Siemens por metro (S/m).

En los metales, es una propiedad muy popular ya que gracias al tipo de unión que existe entre átomos, quedan electrones deslocalizados con libertad de movimiento y logra tener una alta capacidad de transportar electrones.

En el caso de las disoluciones electrolíticas, esta propiedad depende principalmente de la concentración ya que la corriente es transportada a través de los iones de la disolución, y por esta razón varía la conductividad eléctrica de cada material [13].

Con respecto a los polímeros, como se ha mencionado anteriormente, generalmente no son materiales que permiten el transporte de electricidad, sino los únicos capaces son los llamados polímeros conductores. Estos polímeros permiten el paso de electricidad a través de ellos por medio de un mecanismo nombrado efecto dopaje.

Existen dos parámetros que permiten medir dos capacidades del material con respecto a la conductividad eléctrica: la pérdida de electroactividad y la capacitancia específica.

3.1.4. Efecto dopaje

El dopaje es la adición de pequeñas cantidades de ciertos átomos, el cual se encargan de transferir la carga haciendo de dador o aceptor de electrones, y lograr un aumento considerable de la conductividad eléctrica.

Esta adición conduce a una modificación de la cadena polimérica y generan estados energéticos discretos adicionales entre las bandas de valencia y de conducción, que permite el transporte de electrones entre ellas. Existen tres tipos de estados energéticos discretos: solitones, polarones y bipolarones.

Se pueden encontrar dos tipos de dopaje, si se introducen iones negativos en las bandas de valencia dejando a la molécula cargada positivamente se llama dopaje p, pero si se trata de extraer iones positivos de las bandas de conducción dejando a la molécula cargada negativamente se denomina dopado n [14].

3.1.5. Pérdida de electroactividad (LEA)

Es un factor útil para cuantificar la electroestabilidad de un material. Viene dada por la siguiente fórmula:

$$LEA (\%) = \frac{\Delta Q}{Q_2} = \frac{Q_2 - Q_T}{Q_2} 100 \quad (\text{Ec. 3.1})$$

Donde: Q_T es la carga en el último ciclo y Q_2 la carga en el segundo ciclo.

3.1.6. Capacitancia específica (SC)

Propiedad que tiene la materia para almacenar electricidad en un potencial eléctrico dado. La ecuación para su cuantificación es la siguiente:

$$SC (\%) = \left(\frac{Q}{Q_{\text{generación}} * \Delta V * \text{current productivity}} \right) 100 \quad (\text{Ec. 3.2})$$

Donde: $Q_{\text{generación}}$ es la carga de generación de la última capa de polímero, ΔV es intervalo de voltaje utilizado y current productivity corresponde a la productividad de corriente de cada polímero, el valor de cada variable en el estudio a realizar son 0.55 C, 2.3 V y 0,875 mg/C, respectivamente.

Sustancias estudiadas

3.1.7. Poli(3,4-etilendioxitiofeno) (PEDOT)

Es un polímero formado por monómeros de EDOT, presenta una estructura lineal y estable a causa de las uniones entre carbonos es limitada por la presencia de un azufre, el anillo de tiofeno y el grupo etilendioxi.

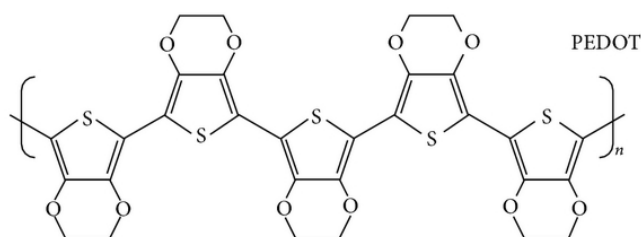


Figura 4: Molécula de PEDOT. [Fuente: 15]

Se caracteriza por su facilidad de dopaje mediante la técnica de potenciometría cuya consecuencia es el incremento de la conductividad eléctrica. Es uno de los más prometedores debido a esta alta conductividad, fácil procesamiento y disponibilidad comercial.

Se comenzó utilizando inicialmente como un revestimiento antiestático en películas fotográficas de AGFA. Actualmente, se han implementado varias aplicaciones nuevas, por ejemplo: material de los condensadores, material para el revestimiento de agujeros de placas de circuito impreso, entre otros [16].

3.1.8. Poli(N-metilpirrol) (PNMPy)

Es un polímero formado por el monómero N-metilpirrol, un monómero derivado del pirrol y se trata de un anillo aromático con un metilo. Presenta una baja conductividad con respecto a otros polímeros conductores pero gran resistencia mecánica y el coste de producción es relativamente bajo.

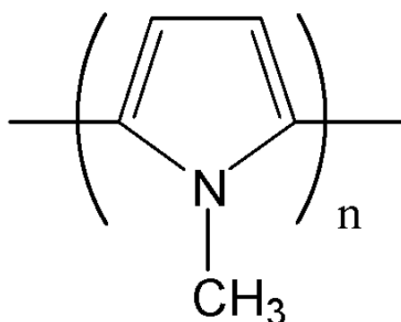


Figura 5: Molécula de PNMPy. [Fuente: 17]

Actualmente, gracias a la gran resistencia mecánica este polímero es muy útil para las aplicaciones de biosensores [18].

3.1.9. Copolímero PEDOT-PNMPy

Se trata de un copolímero resultante de la mezcla de los dos anteriores, ya que por un lado el PEDOT es el polímero más estable disponible actualmente, y el PNMPy tiene mayor resistencia a la corrosión por su potencial de oxidación, más alto que el del PEDOT pero cercano. Por esta razón se han combinado ambos polímeros conductores típicos con aplicaciones potenciales prometedoras para producir nuevos copolímeros con propiedades intermedias entre los dos [8].

3.1.10. Neurotransmisores

Se tratan de sustancias químicas producidas por el cuerpo que transmiten información entre neuronas, a través de la sinapsis de las neuronas. Existen diferentes tipos de neurotransmisores y cada uno de ellos se encargan de distintas funciones.

Actualmente se han descubierto más de 60 tipos de neurotransmisores, pero se estudiarán dos de los más importantes: dopamina y serotonina [19].

3.1.10.1. Dopamina

La dopamina es una hormona y neurotransmisor que se encuentra en el cuerpo, incluyendo a animales vertebrados como invertebrados. Químicamente se llama 3,4-dihidroxifenilamina (DA) y se trata de un grupo amino unida a una amina. Es sintetizado a partir del aminoácido L-tirosina [19].

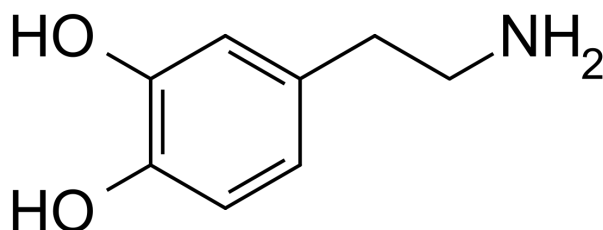


Figura 6: Molécula de dopamina. [Fuente: 20]

Se encuentra implicada en las conductas adictivas y es la causante de las sensaciones placenteras. No obstante, está involucrada en otras funciones del cuerpo como la regulación de la memoria, los procesos cognitivos, la toma de decisiones, entre otras [19].

3.1.10.2. Serotonina

La serotonina es un neurotransmisor sintetizado a partir de un aminoácido que no es producido por el cuerpo sino aportado a través de la dieta llamado triptófano. Es conocida químicamente como 5-hidroxitriptamina (5-HT), es una monoamina biogena, es decir, un grupo amino conectado a un anillo aromático a través de cadenas de carbono [21].

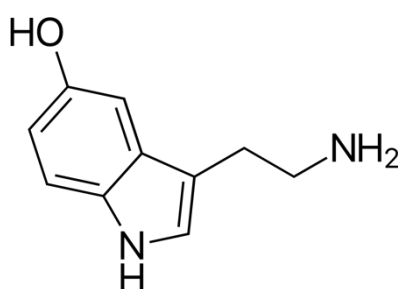


Figura 7: Molécula de la serotonina. [Fuente: 22]

Con respecto a sus funciones en el cuerpo, es conocido comúnmente como la hormona de la felicidad ya que los niveles bajos son asociados a la depresión, pero se encuentra involucrada en otras funciones: ayuda a la digestión, control de la temperatura corporal, su influencia en el deseo sexual, entre otros. [19].

4. Técnicas de caracterización

En la realización de este proyecto se utilizan una serie de métodos electroquímicos donde se aprovecha el potencial, la corriente o la carga como señal analítica, mientras se ensayan los diferentes polímeros multicapas y sensores: multicapa con sales incrustada y multicapa nanoperforada, para determinar la concentración de dopamina/serotonina.

En la clasificación de las técnicas electroquímicas existe una división simple, las técnicas físicas que miden una propiedad en el seno de la solución en una celda electroquímica, y técnicas interfaciales en las que se mide la carga, el potencial o la corriente que dependen de las especies presentes en la interfaz de un electrodo y la solución que lo rodea, y se subdivide en estacionarias y transitorias.

- Las técnicas estacionarias: existe una ausencia de control de la corriente en la celda, se encuentran métodos como la potenciometría.
- Las técnicas transitorias: la corriente es controlada, en función del tiempo y se encuentran dos tipos: los potencioestáticos, a potencial constante o controlado, y los galvanostáticos, a intensidad constante o controlada [23]

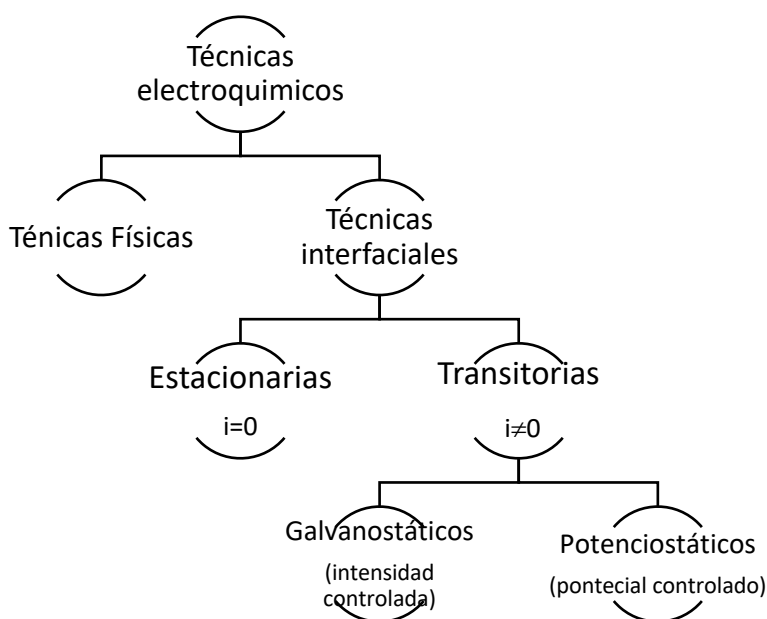


Figura 8: Clasificación de las técnicas electroquímicas. [Fuente: Propia]

Los métodos potencioestáticos, la ciclovoltamperometría, cronoamperometría y cronopotenciometría, son los utilizados para cada generación y ensayo del proyecto.

La ejecución de estas técnicas electroquímicas se lleva a cabo en una celda electroquímica, lugar donde ocurren las reacciones, en este caso de oxidación y reducción. En las reacciones de oxidación y

reducción, llamadas REDOX, tiene lugar un intercambio de electrones de las sustancias y existe un elemento que cede electrones (agente reductor) y otro que acepte electrones (agente oxidante).

Celda electroquímica

La generación y caracterización de los polímeros, además de la detección de los neurotransmisores utilizando el sensor creado, se realiza en una celda electroquímica. Existen dos tipos celdas: galvánicas y electrolíticas. Estas últimas son las empleadas para la ejecutar este proyecto [24].

Las celdas electrolíticas están formadas por dos conductores llamados electrodos, que ambos están sumergidos en la solución electrolítica y contiene el agente a reducirse u oxidarse. Para el funcionamiento de la celda electrolítica se necesita una fuente de energía externa que permita la reacción no espontanea.

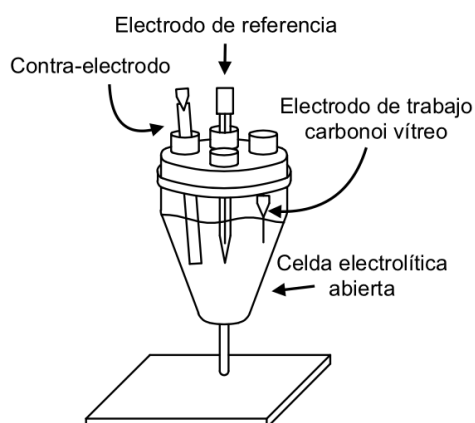


Figura 9: Diagrama de las partes de una celda electrolítica. [Fuente: Propia]

Ciclovoltamperometría

La ciclovoltamperometría, también llamada voltamperometría cíclica, es uno de los métodos mas utilizados en la electroquímica para obtener datos cuantitativos de la concentración de una muestra, ya que aporta una información rápida, fácil y completa los procesos de reducción y oxidación de esta.

Trata de la variación constante y controlada del potencial en función en tiempo, es decir, se comienza con un voltaje inicial hasta alcanzar el voltaje máximo y posteriormente se invierte el proceso hasta alcanzar un voltaje inicial. Este proceso se puede repetir el número de veces que se desee en reacciones reversibles, como es el caso de las reacciones estudiadas en el proyecto.

Durante la ejecución de la ciclovoltamperometría se puede medir la intensidad de respuesta al potencial aplicado y graficar estas dos variables. Se obtiene una imagen que se puede observar fácilmente la parte de la reacción de oxidación y la parte de correspondiente a la reacción de reducción.

Gracias a esta herramienta gráfica principalmente se puede detectar la presencia del neurotransmisor en el trabajo. Además, se puede estudiar el comportamiento de las multicapas y condicionar correctamente el sensor para su utilización.

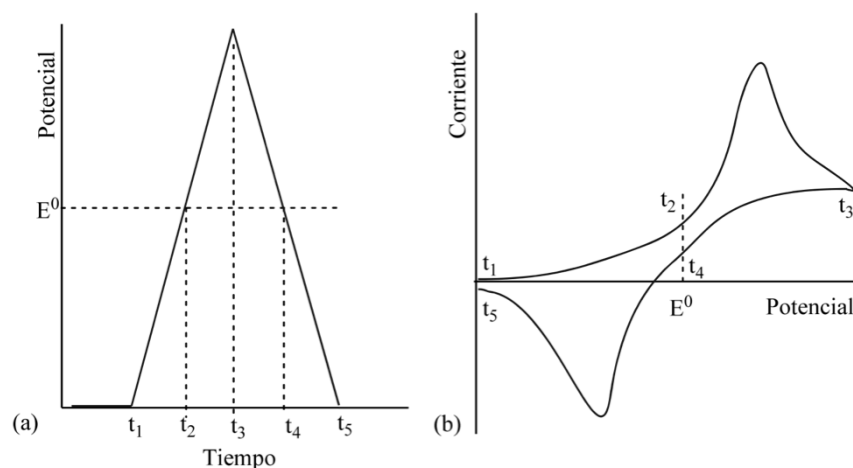


Figura 10: a) Cambio del potencial en función al tiempo. B) Curva corriente/potencial resultante de una ciclovoltamperometría. [Fuente: [24]].

4.1.1. Ciclovoltamperometría de control

Se trata de una variante de la ciclovoltamperometría utilizada durante el proyecto. Se ejecuta solo un ciclo y a través de la gráfica resultante se puede verificar la pureza, calidad y la inexistencia de algún elemento que interfiera en la electrodeposición de la generación del polímero en los electrodos. Y así no provocar algún error en los resultados finales de lectura y detección del sensor creado.

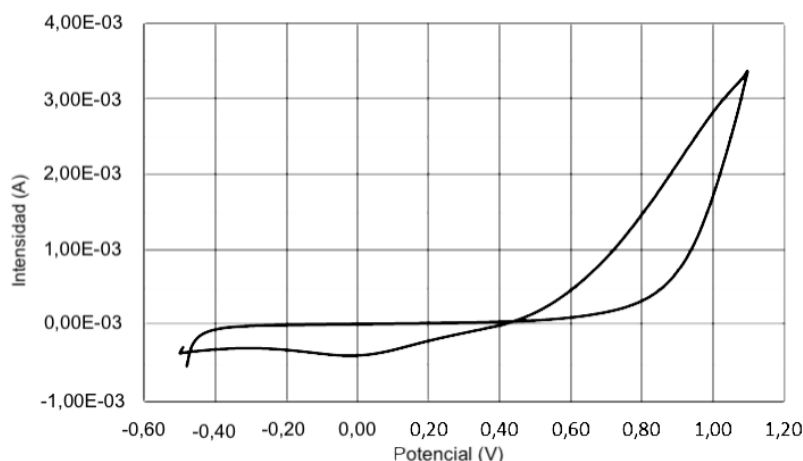


Figura 11: Ciclovoltamperometría de control de la solución EDOT utilizada. [Fuente: Propia]

Cronopotenciometría

Es una técnica electroquímica donde la corriente es controlada y constante mientras el potencial se convierte en la variable dependiente que es determinada en función del tiempo. Como resultado la electrólisis se efectúa a una velocidad constante y las concentraciones de las sustancias que participan en la reacción electroquímica comienzan a variar en la superficie del electrodo.

Esta técnica se utiliza para la caracterización del copolímero, y así poder observar la respuesta del potencial durante un cierto tiempo. [25]

Cronoamperometría

Se trata de una técnica electroquímica que mide la intensidad de corriente que fluye por el electrodo de trabajo, sumergido en una solución electrolítica a un potencial inicial desde un valor que no produce reacción a un valor donde las especies activas reaccionan. Además, permite obtener el coeficiente de difusión y los parámetros cinéticos [26].

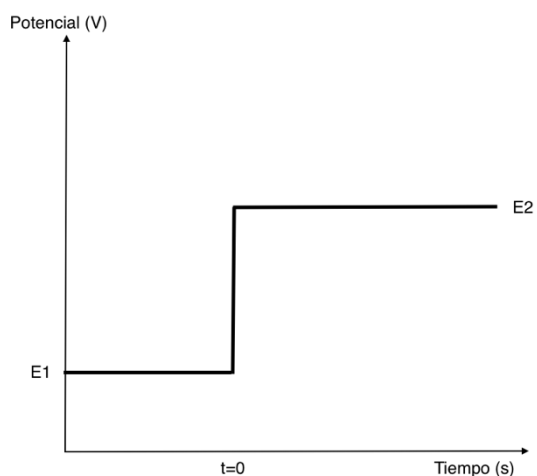


Figura 12: Variación del potencial durante la cronoamperometría. [Fuente: Propia]

Gracias a esta herramienta gráfica se puede generar las multicapas sobre el electrodo de trabajo.

5. Materiales y reactivos

Para llevar a término las técnicas y métodos del proyecto, son necesarios los materiales, instrumentos y reactivos disponibles en el laboratorio del IMEM, descritos en el siguiente apartado.

Reactivos

Para estudiar las propiedades físico-químicas y la correcta utilización y manipulación, se han tenido en cuenta las fichas de seguridad de cada sustancia química, encontradas en el *Anexo 1*. Así como también a la hora de su eliminación, se han consultado los protocolos necesarios para su correcto vertido en los bidones del laboratorio, descritos en el apartado de Seguridad e impacto medioambiental.

5.1.1. Acetona

Es compuesto orgánico, perteneciente al grupo de cetonas. Es un líquido incoloro con un olor peculiar y se evapora a temperatura ambiente. Se debe utilizar con cuidado ya que es inflamable e irritante.

Fórmula: C_3H_6O .

Propiedades físico químicas: (medidas a 20°C y 1 atm).

- Peso molecular [g/mol]: 58,08.
- Densidad [g/cm³]: 0,79.
- Punto de ebullición [°C]: 56.
- Punto de fusión [°C]: -95
- Temperatura de almacenamiento: ambiente.

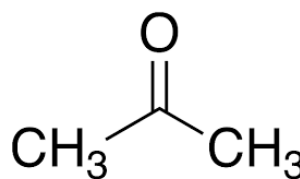


Figura 13: Molécula de la acetona. [Fuente: [27]]

Se emplea en pequeñas cantidades para la limpieza y acondicionamiento de los electrodos de trabajo y contra-electrodo, y es utilizado el de la marca Panreac con un 99 % de pureza.

5.1.2. Acetonitrilo

Es compuesto orgánico. Es un líquido incoloro tiene una polaridad mediana miscible en agua. Se debe utilizar con cuidado ya que es inflamable y tóxico.

Fórmula: C_2H_3N

Propiedades físico químicas: (medidas a 20°C y 1 atm).

- Peso molecular [g/mol]: 41,05

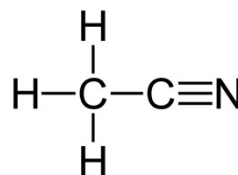


Figura 14: Molécula del acetonitrilo. [Fuente: [28]]

- Densidad [g/ cm³]: 0,786.
- Punto de ebullición [°C]: 82
- Punto de fusión [°C]: -45
- Temperatura de almacenamiento: ambiente.

Se utiliza como disolvente para las soluciones electrolíticas de polímeros y para formar una disolución con el perclorato de litio y poder realizar la caracterización de los polímeros conductores. El empleado durante el proyecto es de la marca Panreac con una pureza del 99%.

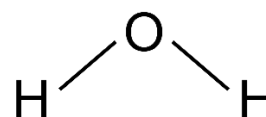
5.1.3. Agua desionizada

Es un líquido incoloro, inodoro y transparente. El agua desionizada es agua sin cationes naturales, pero con impurezas no iónicas. No representa ningún peligro para su manipulación, solo se debe tener cuidado y no tenga contacto con equipos eléctricos que ocasione algún accidente.

Fórmula: H₂O.

Propiedades físico químicas: (medidas a 20°C y 1 atm).

- Peso molecular [g/mol]: 18.
- Densidad [g/L]: 1.
- Punto de ebullición [°C]: 100.
- Punto de fusión [°C]: 0.



*Figura 15: Molécula de agua.
[Fuente: [29]]*

Durante el proyecto se utiliza para la disolución de NaCl 20% y para la limpieza de los instrumentos y electrodos que se emplean.

5.1.4. Agua MilliQ

Al igual que agua desionizada, es un líquido transparente, incoloro e inodoro. Pero a esta se le realiza un proceso para la eliminación de impurezas no iónicas que se encuentran en el agua desionizada, logrando obtener un agua “pura”.

Fórmula: H₂O.

Propiedades físico químicas: (medidas a 20°C y 1 atm).

- Peso molecular [g/mol]: 18.
- Densidad [g/L]: 1.
- Punto de ebullición [°C]: 100.

- Punto de fusión [°C]: 0.
- Resistividad [$M \cdot \Omega \cdot cm$]: 18,2.

5.1.5. Cloruro de potasio

Es una sal blanca e inodora. No representa ningún peligro en su manipulación.

Fórmula: KCl

Propiedades físico químicas: (medidas a 20°C y 1 atm).

- Peso molecular [g/mol]: 74,55.
- Densidad [g/cm^3]: 1,98

Es utilizada en el proyecto para la realización de la solución de PBS, y es empleado el de la marca Panreac con un 99 % de pureza.

5.1.6. Cloruro de sodio

Es una sal de color blanco a temperatura ambiente e inodora. No representa ningún peligro para su utilización.

Fórmula: NaCl

Propiedades físico químicas: (medidas a 20°C y 1 atm).

- Peso molecular [g/mol]: 58,44.
- Densidad [g/cm^3]: 2,16

En el proyecto es empleado para la realización de la solución de PBS y la solución de NaCl 20%, y es utilizado el de la marca Panreac con un 99 % de pureza.

5.1.7. Dihidrogenofosfato de potasio

Es un sólido color blanco e inodora. Es utilizada comúnmente para la realización de soluciones tampón. No presenta riesgos en su manipulación.

Fórmula: KH_2PO_4

Propiedades físico químicas: (medidas a 20°C y 1 atm).

- Peso molecular [g/mol]: 136,08.
- Densidad [g/cm^3]: 2,33.

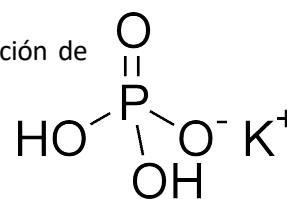


Figura 16: Molécula de dihidrógeno fosfato de potasio. [Fuente: [30]].

Es utilizada en el proyecto para la realización de la solución de PBS, y es empleado el de la marca Panreac con un 99 % de pureza.

5.1.8. 3,4-etilendioxitiofeno (EDOT)

Es un líquido viscoso con olor muy fuerte. Se debe utilizar con cuidado ya que es una sustancia tóxica y nociva.

Fórmula: $C_2H_4O_2C_4H_2S$

Propiedades físico químicas: (medidas a 20°C y 1 atm).

- Peso molecular [g/mol]: 142,17
- Densidad [g/L]: 1,33.
- Punto de ebullición [°C]: 193.
- Temperatura de almacenamiento: aproximadamente 5°C. Guardado en la nevera.

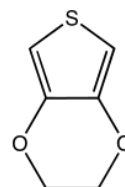


Figura 17: Molécula de EDOT. [Fuente: [31]].

Es empleado para las soluciones electrolíticas para generar las capas de polímeros PEDOT y el copolímero PEDOT-PNMPy. Es utilizado el de la marca Sigma-Aldrich de una pureza del 97%.

5.1.9. Etanol

Es una sustancia orgánica, conocida comúnmente como alcohol etílico. Es un líquido incoloro, miscible en agua. Se debe tener cuidado con su manipulación ya que es una sustancia irritante, inflamable y sus gases pueden provocar explosión.

Fórmula: C_2H_5OH

Propiedades físico químicas: (medidas a 20°C y 1 atm).

- Peso molecular [g/mol]: 46,07.
- Densidad [g/L]: 0,789.
- Punto de ebullición [°C]: 78,37.
- Punto de fusión [°C]: -114,1.
- Temperatura de almacenamiento: ambiente.

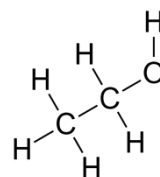


Figura 18: Molécula de etanol. [Fuente: [32]]

Se emplea en pequeñas cantidades para la limpieza y acondicionamiento de los electrodos de trabajo y contra-electrodo, y es utilizado el de la marca Panreac con un 99 % de pureza.

5.1.10. Fosfato disódico

Es una sal blanca e inodora. No representa ningún tipo de peligro.

Fórmula: Na_2HPO_4

Propiedades físico químicas: (medidas a 20°C y 1 atm).

- Peso molecular [g/mol]: 46,07.
- Densidad [g/L]: 0,789.
- Punto de ebullición [°C]: 78,37.
- Punto de fusión [°C]: -114,1.

Es utilizada en el proyecto para la realización de la solución de PBS. Es empleado el de la marca Panreac con un 99 % de pureza.

5.1.11. Nitrógeno gas

Es un gas, presente también en la atmosfera terrestre. No representa ningún tipo de peligro.

Fórmula: N_2 .

Propiedades físico químicas: (medidas a 20°C y 1 atm).

- Peso molecular [g/mol]: 14,01
- Densidad [g/cm³]: 1,23.

Se ha utilizado para desoxigenar las soluciones electrolíticas de polímeros conductores.

5.1.12. N-metilpirrol (NMPy)

Es un líquido viscoso amarillento con un olor muy fuerte. Se debe utilizar con cuidado ya que es una sustancia tóxica y nociva.

Fórmula: $\text{C}_5\text{H}_7\text{N}$.

Propiedades físico químicas: (medidas a 20°C y 1 atm).

- Peso molecular [g/mol]: 81,12.
- Densidad [g/L]: 0,91.
- Temperatura de almacenamiento: aproximadamente 5 °C. Guardado en la nevera.

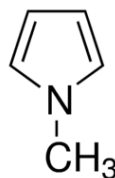


Figura 19: Molécula de NMPy. [Fuente: [33]]

Es empleado para las soluciones electrolíticas para generar las capas de polímeros PNMPy y el copolímero PEDOT-PNMPy, de la marca Sigma-Aldrich de una pureza del 99%.

5.1.13. Perclorato de litio

Es una sal blanca e inodora. Comúnmente utilizada como dopante en la síntesis de polímeros. Se debe manipular con cuidado ya que es oxidante, irritante y puede ocasionar explosión.

Fórmula: LiClO_4

Propiedades físico químicas: (medidas a 20°C y 1 atm).

- Peso molecular [g/mol]: 46,07.
- Densidad [g/L]: 0,789.

Es utilizado en el proyecto como electrolito de fondo en la electrogeneración y caracterización de los polímeros. Es empleado de la marca Sigma-Aldrich con una pureza del 99,99%.

Materiales e instrumentos

Para la realización del proyecto se utilizan una serie de materiales e instrumentos que se encuentran disponibles en el laboratorio del IMEM. Dentro de los materiales principales se encuentran: la celda electroquímica, en este caso se trata de una celda electrolítica que contiene los polímeros de estudio, los diferentes electrodos que conectados al pontenciostato/galvanostato se puede obtener los datos experimentales de los ensayos al contenido en la celda electrolítica y por último, el ordenador para la traducción de los datos experimentales captados a través de la utilización de un software.

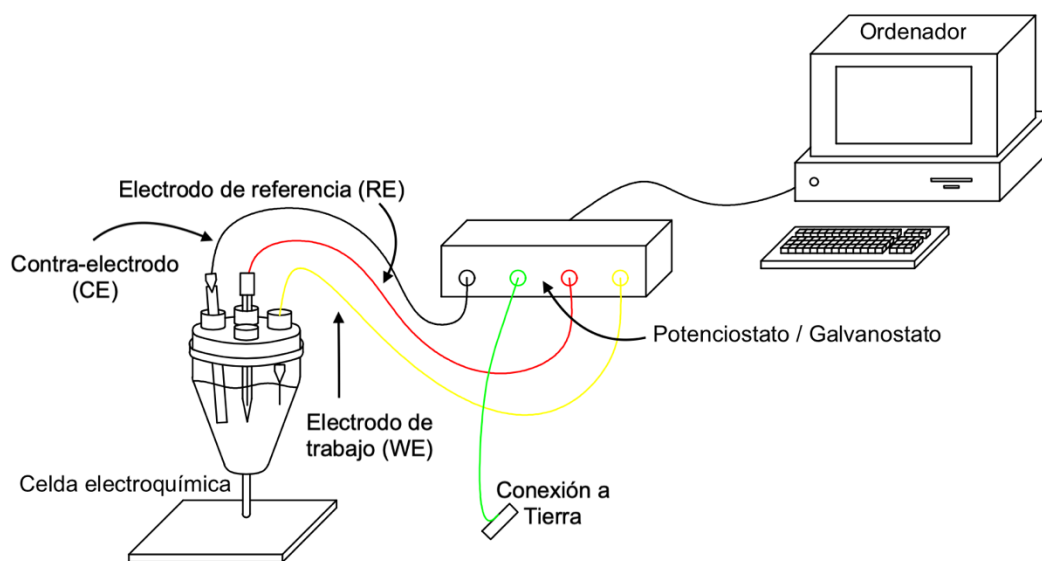


Figura 20: Conexión de cada instrumento durante la realización del sensor del proyecto. [Fuente: Propia].

5.1.14. Celda electrolítica: Celda abierta

En la realización de este proyecto se utilizan celdas troncocónicas de vidrio de color transparente de forma abierta con capacidad de 25 mL, se ajustan a una tapa de cinco bocas de entrada. Las celdas se emplean para la generación y caracterización de los polímeros y ensayos de detección de los neurotransmisores.

5.1.15. Contra electrodo (CE)

El contra electrodo empleado es de acero inoxidable AISI 1 x 10 cm. Sirve como cátodo en la celda electroquímica.

5.1.16. Electrodo de referencia (RE)

Se trata de un electrodo de plata / cloruro de plata. Permite la medición del potencial de la disolución analizada sin verse involucrado en la reacción. En el experimento se introduce por la boca del soporte para que se encuentre sumergido dentro de la solución electrolítica contenida en la celda.

5.1.17. Electrodo de trabajo (WE)

Se utilizan dos electrodos de trabajo en la realización del proyecto.

5.1.17.1. Electrodo de acero AISI

Trata de una lamina de acero inoxidable AISI con medidas de 1 x 10 cm. En el proyecto se delimita la zona de generación del polímero (2 x 1 cm) y se condiciona la zona con una correcta limpieza, se sujeta a la boca del soporte con ayuda de una goma y se electrodepositan las diferentes capas de polímeros.

5.1.17.2. Electrodo de carbono vítreo

Electrodo circular de 2 mm de diámetro fabricado en carbono vítreo o *Glassy carbon*. Es un material inerte e impermeable a los gases. En el proyecto se emplea para la electrodeposición de las diferentes capas de polímeros, sobre la zona delimitada con ayuda de una cinta Kapton.

5.1.18. Instrumentos de laboratorio

- Balanza analítica.
- Baño de ultrasonido.
- Celda abierta y soporte.
- Cinta Kapton.
- Embudo alemán.
- Espátula.
- Matraz aforado de 10 mL.
- Matraz aforado de 50 mL.
- Matraz aforado de 100 mL.
- Micropipeta de 0,5 – 10 μ L.
- Micropipeta de 10 – 100 μ L.
- Papel absorbente.
- Papel de lija de grano muy fino (P4000).
- Pesas sustancias.
- Pipeta Pasteur.
- Probeta de 50 mL
- Rotulador.
- Tapones
- Tubos de ensayo.
- Tubos Eppendorf.
- Vaso precipitado de 500 mL.

5.1.19. Ordenador

Es un equipo de uso común en el laboratorio y es necesario para el uso del potencióstato y la ejecución de los procesos del programa NOVA 2.1.

5.1.20. Potenciostato – Galvanostato (Autolab)

Es el dispositivo encargado de controlar la corriente y el potencial generado en la celda electrolítica a través de cuatro conectores unidos a los tres electrodos de la celda y a un elemento metálico para la toma de tierra. Se ha utilizado de la marca AUTOLAB modelo PGSTA 101 y 204.



Figura 21: Potenciostato/Galvanostato utilizado en el proyecto de la marca AUTOLAB modelo PGSTA 204. [Fuente: propia].

Programas computacionales

5.1.21. Programa NOVA 2.1.

Es un programa que realiza la traducción de los datos obtenidos en la celda electrolítica a través del potenciostato cuando se ejecutan los procesos de ciclovoltamperometría y cronoamperometría.

6. Método experimental

En este capítulo se describe el estudio experimental que se realiza para la ejecución del proyecto. Se encuentra dividido en las siguientes partes:

- Las dos primeras partes, especifican las soluciones que se deben realizar y se emplean durante la ejecución del proyecto.
- La tercera, se refiere a la generación y el estudio de los films compuestos por el copolímero
- La última parte, narra la elaboración del sensor y la detección de los neurotransmisores con su utilización.

Preparación de las soluciones

Se preparan dos diferentes tipos de soluciones. Las primeras engloban las que se utilizan para la generación y caracterización de los films que contienen las capas de polímero apartado 6.2, y las segundas son las utilizadas para la detección de los neurotransmisores con el sensor apartado 6.3.

Los reactivos utilizados en las soluciones son:

- Agua destilada.
- Agua MilliQ.
- Cloruro de potasio.
- Cloruro de sodio.
- EDOT.
- Fosfato monopotásico.
- Dihidrogenofosfato de sodio.
- NMPY.
- Perclorato de litio.

Con respecto a los materiales que se utilizan:

- Balanza analítica.
- Embudo alemán.
- Espátula.
- Matraz aforado de 1000 mL.
- Matraz aforado de 10 mL.
- Matraz aforado de 50 mL.
- Pesa sustancia.

- Pipeta Pasteur.
- Rotulador.

6.1.1. Soluciones electrolíticas

Se realizan las soluciones electrolíticas según los procedimientos estándares y con las siguientes características:

- EDOT 10 mM. 0,071 g EDOT + 0,534 g perclorato de litio enrazado a 50 mL con acetonitrilo.
- NMPY 10 mM. 0,0405 g MNPy + 0,534 g perclorato de litio enrazado a 50 mL con acetonitrilo.
- EDOT + NMPY 10 mM. 0,071 g EDOT + 0,0202 g MNPy + 0,534 g perclorato de litio enrazado a 50 mL con acetonitrilo.
- LiClO₄ 0,05 M. 0,534 g perclorato de litio enrazado a 50 mL con acetonitrilo.
- NaCl 20% en agua destilada.

Se conservan en la nevera aquellas soluciones que tienden a oxidarse.

Se lleva a cabo la comprobación de la pureza y la ausencia de impurezas en las soluciones electrolíticas de EDOT, NMPY y mezcla de los dos, y se realiza una ciclovoltamperometría de control descrita en el apartado 6.5.1.

6.1.2. Soluciones stock

Se elaboran las soluciones según procedimientos estándares y con las siguientes características:

- PBS 0,1 M.
- Dopamina 1 mM en agua MilliQ.
- Serotonina 1 mM en agua MilliQ.

Las soluciones de los neurotransmisores se preparan diariamente cuando se vayan a utilizar en la detección y conservar en hielo ya que su oxidación es rápida.

Preparación y caracterización de la multicapa PEDOT y copolímero PEDOT-PNMPy

6.1.3. Generación de la multicapa PEDOT y copolímero PEDOT-PNMPy en el electrodo de acero.

Se realizan varios electrodos multicapas con diferentes características, descritas en la siguiente tabla, donde se especifica los valores de cada carga para los polímeros generados, el voltaje utilizado, si se sumerge en la disolución salina y si se disuelve la sal durante la noche de cada film.

Tabla 1: Resumen de las características de las multicapas a generar en los electrodos.

	Multicapa	V (V)	Q (C) PEDOT	Q (C) COPOLIMERO	NaCl 20%	Lavado (noche)
Film 1	PEDOT/COP/NaCl/COP/PEDOT	1,4	0,550	0,200	Si	No
Film 3				0,400		
Film 5				0,550		
Film 7				0,700		
Film 9				0,900		
Film 2	PEDOT/COP/poro/COP/PEDOT	1,4	0,550	0,200	Si	Si
Film 4				0,400		
Film 6				0,550		
Film 8				0,700		
Film 10				0,900		

6.1.3.1. Material

- Celdas abiertas y soporte (2x).
- Contra-electrodos de acero AISI 1 cm² (2x).
- Electrodo de acero limpio.
- Electrodo de referencia de Ag/AgCl.

- Ordenador.
- Potenciostato.
- Probeta.
- Tapones.
- Tubos de ensayo.
- Acetona.
- Agua destilada.
- Etanol.
- Solución de cloruro de sodio.
- Solución de EDOT.
- Solución del copolímero EDOT-NMPy.

6.1.3.2. Procedimiento

1. Se vierten 10 mL de EDOT medidos con una probeta dentro de la celda de vidrio.
2. Se procede al montaje de la celda electrolítica.
3. Se tapan los orificios abiertos y se conecta el borboteador durante 5-10 min, cuando pase este tiempo tapar el orificio para que no salga el gas.
4. Se ejecuta el proceso correspondiente a la generación de la primera capa con una carga de 550 mC, descrito en el apartado 6.5.2.
5. Preparada la primera capa, se extraen con rapidez los electrodos de trabajo y de referencia, y se taponan.
6. Se repiten los pasos del montaje de la celda descritos anteriormente para tener una segunda celda de generación diferente y facilitar el trabajo (puntos 1-4 del apartado 6.2.1.2), pero con 10 mL de la disolución del copolímero EDOT-NMPy, se repite el procedimiento de generación con la carga del copolímero según la tabla 1, descrito en el apartado 6.5.2.
7. Se extrae el electrodo de trabajo, se cubre el orificio de la celda con ayuda de un tapón.
8. Se sumerge la zona generada del electrodo de trabajo en la solución de NaCl durante 5 segundos. Se deja secar en el aire.
9. Una vez seca, se vuelve a colocar el electrodo de trabajo en la celda que se tiene la disolución del copolímero.
10. Se ejecuta el proceso correspondiente a la generación de la tercera capa del polímero, con la carga misma carga utilizada en el paso 6.
11. Se vuelven a introducir los electrodos de trabajo y referencia en la primera celda utilizada que contiene EDOT 10 mM.
12. Se ejecuta el procedimiento correspondiente a la generación última capa de polímeros, con las mismas condiciones de la primera capa generada de PEDOT.

El resultado de este proceso es una capa azul oscuro, homogénea y con cristales incrustados como se muestra en la figura 22.

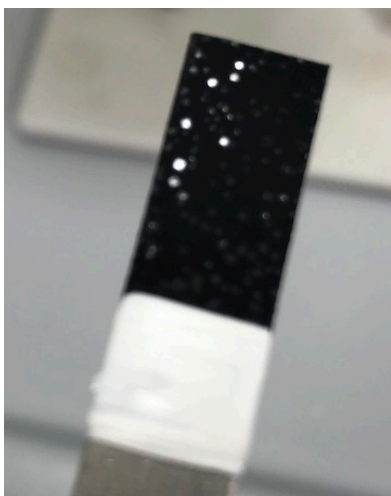


Figura 22: Electrodo con la generación resultante [Fuente: propia]

13. Solo aquellos electrodos que contengan poros se disuelve la sal dejándolo sumergidos en agua durante toda la noche.

6.1.4. Caracterización de la multicapa PEDOT y copolímero PEDOT-PNMPy

6.1.4.1. Material

- Celda abierta.
- Contra-electrodo de acero AISI 1 cm².
- Electrodo de acero con el polímero generado.
- Electrodo de referencia Ag/AgCl.
- Ordenador.
- Potenciostato.
- Tapones.
- Solución de perclorato de litio.

6.1.4.2. Procedimiento

1. Se vierte 10 mL de la disolución de perclorato de litio medidos con una probeta dentro de la celda de vidrio.
2. Se procede al montaje de la celda electrolítica, y se sumerge hasta el área delimitada que contiene el polímero el electrodo de trabajo.

3. Se ejecuta cada una de las pruebas de ciclovoltamperometría y cronopotenciometría, descritas en el apartado 6.5.3. y 6.5.4, respectivamente.

Preparación del electrodo de multicapa

6.1.5. Generación de las multicapas de polímeros en el electrodo de *Glassy Carbon*.

Se realizan varias generaciones en los electrodos con las diferentes características necesarias, descritas en la siguiente tabla:

Tabla 2: Resumen de las características de las multicapas a generar en los electrodos.

Multicapa	V (V)	Tiempo de generación (s)				NaCl 20%	Lavado (noche)
		1º capa	2º capa	3º capa	4º capa		
PEDOT/COP/poro/COP/PEDOT	1,4	1	3	3	3	Si	Sí
PEDOT/PNMPy/poro/PNMPy/PEDOT	1,4	1	3	3	3	Si	Si

6.1.5.1. Material

- Celdas abiertas y soporte (x2).
- Cinta Kepton.
- Contraelectrodos de acero AISI 1 cm² (x2).
- Electrodo de referencia de Ag/AgCl.
- Electrodo de trabajo de glassy carbon condicionado.
- Ordenador.
- Papel absorbente.
- Potenciostato.
- Probeta.
- Tapones.
- Tubo Eppendorf.
- Agua destilada.
- Solución de cloruro de sodio.
- Solución de EDOT.
- Solución de NMPy.
- Solución del copolímero EDOT-NMPy.

6.1.5.2. Procedimiento

1. Se vierte 10 mL de EDOT medidos con una probeta dentro de la celda de vidrio.
2. Se procede al montaje de la celda electrolítica y se ajusta el electrodo de trabajo sumergiendo la zona de interesada sin sobrepasar la cinta Kapton (colocada en la periferia del carbono vítreo).
3. Se tapan los orificios con ayuda de tapones y se suministra nitrógeno durante 5-10 min a la disolución electrolítica,
4. Se colocan los conectores del potencióstato que corresponden a cada elemento en la celda.
5. Se ejecuta el procedimiento correspondiente a la primera capa de PEDOT según especificaciones de la tabla 2, descrito en el apartado 6.5.2. Se espera a que acabe de generarse.
6. Se repiten los pasos del montaje de la celda descritos anteriormente para tener una segunda celda de generación diferente y facilitar el trabajo (puntos 1-6 del apartado 6.3.1.2), pero con la disolución correspondiente a la segunda capa siguiendo las especificaciones de la tabla 2.
7. Se ejecuta el proceso correspondiente a la generación de la segunda capa del polímero. Descrito el procedimiento del NOVA 2.1 en el apartado 6.5.2.
8. Se extrae el electrodo y se sumerge la zona generada del electrodo de trabajo en la disolución de NaCl 20% durante 5 segundos. Se deja secar en el aire.
9. Una vez seca, se vuelve a colocar el electrodo de trabajo en la celda que se tiene la disolución de NMPy o del copolímero.
10. Se ejecuta el proceso correspondiente a la generación de la tercera capa del polímero, con el mismo tiempo de carga utilizado para generar la segunda capa.
11. Se vuelven a introducir los electrodos de trabajo y referencia en la primera celda utilizada que contiene EDOT 10 nM.
12. Se ejecuta el procedimiento correspondiente a la generación última capa de polímeros, tiempo de carga 3 segundos, descrito en la tabla 2.
13. Se coloca el electrodo multicapa generado en un tubo Eppendorf con agua destilada, para la disolución de la sal, durante toda la noche.

Para obtener unos resultados correctos se debe realizar el envejecimiento de este sensor, se ejecuta al día siguiente al electrodo que tiene el poro ya formado una ciclovoltamperometría de 50 ciclos, descrita en el apartado 6.5.3, en la celda electrolítica con 10 mL de PBS.

Detección de los neurotransmisores

6.1.5.3. Material:

- Celda abierta.
- Contra-electrodo de acero AISI 1 cm².
- Electrodo de *Glassy carbon* con el polímero multicapa nanoperforada envejecido.
- Electrodo de referencia Ag/AgCl.
- Micropipeta 10 – 100 μ L.
- Ordenador.
- Potenciostato.
- Tapones.
- Solución de dopamina.
- Solución de serotonina.
- Solución de PBS.

6.1.5.4. Procedimiento:

Para la detección de la dopamina y serotonina, de manera individual o simultánea, se realizan de la siguiente manera:

1. Se vierten 10 mL de PBS en la celda y se procede a su montaje, vigilando que se sumerja la parte que contiene el polímero.
2. Se van realizando las adiciones de los neurotransmisores según el que se quiera ensayar con ayuda de una micropipeta, descritos en las tablas. Se esperan 5 minutos (wait time).
3. Se realiza una ciclovoltamperometría para su detección, descrita en el apartado 6.5.5.
4. Se repite el procedimiento hasta obtener el total de adiciones deseadas.

Las adiciones para la detección son las siguientes:

6.1.6. Detección de los neurotransmisores de manera individual:

Tabla 3: Adiciones correspondientes a la detección de dopamina.

[DA] (μ M)	0	5	10	15	20	25	30	35	40	45	50	60	70	80	90	100
Vañadir (μ L)	0	50	50	50	50	50	50	50	50	50	100	100	100	100	100	100

Tabla 4: Adiciones correspondientes a la detección de serotonina.

[5-HT] (μM)	0	5	10	15	20	25	30	35	40	45	50	60	70	80	90	100
Vañadir (μL)	0	50	50	50	50	50	50	50	50	50	100	100	100	100	100	100

6.1.7. Detección de los neurotransmisores de manera simultánea:

6.1.7.1.1 Concentración de dopamina y serotonina aumentando a la vez

Tabla 5: Adiciones correspondientes de dopamina y serotonina para la detección simultánea de ambos neurotransmisores.

[DA] y [5-HT] (μM)	0	5	10	15	20	25	30	35	40	45	50	60	70	80	90	100
Vañadir de DA y 5-HT (μL)	0	50	50	50	50	50	50	50	50	50	100	100	100	100	100	100

6.1.7.1.2 Concentración de dopamina en presencia de serotonina

Se realiza la adición de 350 μL de serotonina con ayuda de una micropipeta, y se va añadiendo dopamina según la tabla 3 y se detecta mediante una ciclovoltamperometría, descrita en el apartado 6.5.5.

6.1.7.1.3 Concentración de serotonina en presencia de la dopamina

Se realiza la adición de 350 μL de dopamina con ayuda de una micropipeta, y se va añadiendo serotonina según la tabla 4 y se detecta mediante una ciclovoltamperometría, descrita en el apartado 6.5.5.

6.1.8. Límites de detección

Ambos límites se determinan de manera experimental, llevando a cabo este procedimiento:

1. Se realizan las detecciones de los neurotransmisores adicionando las soluciones de cada uno de ellos poco a poco hasta obtener señal en la ciclovoltamperometría.

Las adiciones de cada uno de la dopamina y serotonina son las siguientes:

6.1.8.1.1 Mínimo de detección

Tabla 6: Adiciones correspondientes al límite de detección de dopamina.

[DA] (μM)	0	0,5	1,0	1,5	2,0	2,5
$V_{\text{añadir}}$ (μL)	0	5	5	5	5	5

Tabla 7: Adiciones correspondientes a la detección de serotonina.

[5-HT] (μM)	0	0,5	1,0	1,5	2,0	2,5
$V_{\text{añadir}}$ (μL)	0	5	5	5	5	5

Programas NOVA 2.1

El resumen de los programas utilizados para cada uno de los ensayos y generaciones se encuentra en este sub-apartado.

6.1.9. Ciclovoltamperometría de control

Se ejecuta el siguiente programa:

- **Procedimiento:** Cyclic voltammetry potentiostatic.
- **Autolab Control:** → **Currentrange:** 1 mA.
- **Apply:** -0,49 V.
- **CV staircase:**
 - **Start Potential:** -0,49 V.
 - **Upper Vertex:** 1,8 V.
 - **Lower Vertex:** -0,5 V
 - **Stop Potential:** -0,49 V
 - **Number of scans:** 1.
 - **Step:** 0,01.
- **Record signals:**
 - **Sampler:** Seleccionar WE(1).Current, WE(1).Potential, WE(1).Charge y Time.

- **Plots:** Seleccionar i vs E , i vs t y Q vs t .

6.1.10. Generación de la capa de polímero

Se modifica según las especificaciones que se debe electrodepositar la capa de polímero, ya sea modificando la carga en OPTIONS – Cutoff o limitando los segundos de generación.

- **Procedimiento:** Chronoamperometry ($\Delta t > 1$ ms)
- **Autolab control:**
 - **CurrentRange:** 10 mA.
- **Apply:** 1,4 V.
- **Record signals:**
 - **Sampler:** Seleccionar: WE(1).Current, WE(1).Potential, WE(1).Charge y Time.
- **Plots:** Seleccionar i vs E , i vs t y Q vs t .

6.1.11. Ciclovoltamperometria de caracterización/envejecimiento (CV)

- **Procedimiento:** Cyclic voltammetry potentiostatic.
- **Autolab Control:** → **Currentrange:** 1 mA.
- **Apply:** -0,49 V.
- **CV staircase:**
 - **Start Potential:** -0,49 V.
 - **Upper Vertex:** 1,6 V.
 - **Lower Vertex:** -0,5 V
 - **Stop Potential:** -0,49 V
 - **Number of scans:** 50.
 - **Step:** 0,01.
- **Record signals:**
 - **Sampler:** Seleccionar WE(1).Current, WE(1).Potential, WE(1).Charge y Time.
 - **Plots:** Seleccionar I vs E , i vs t y Q vs t .

6.1.12. Cronopotenciometria (CP)

- **Procedimiento:** Chrono potentiometry ($\Delta t > 1$ ms)
- **Autolab control:**
 - **CurrentRange:** 1 mA.
- **Apply:** 1,4 V.

- **Record signals:**
 - **Sampler:** Seleccionar: WE(1).Current, WE(1).Potential, WE(1).Charge.
- **Plots:** Seleccionar E vs t y Q vs t.

6.1.13. Ciclovoltamperometria de detecció

- **Procedimento:** Cyclic voltammetry potentiostatic.
- **Autolab Control:** → **Currentrange:** 1 mA.
- **Apply:** -0,49 V.
- **CV staircase:**
 - **Start Potential:** -0,49 V.
 - **Upper Vertex:** 0,8 V.
 - **Lower Vertex:** -0,41 V
 - **Stop Potential:** -0,4 V
 - **Number of scans:** 5.
 - **Step:** 0,01.
- **Record signals:**
 - **Sampler:** Seleccionar WE(1).Current, WE(1).Potential, WE(1).Charge y Time.
 - **Plots:** Seleccionar i vs E, i vs t y Q vs t.

7. Análisis de los resultados

Este apartado se muestran los resultados obtenidos, a partir de los datos experimentales recogidos mediante el programa NOVA 2.1. durante la ejecución del método experimental explicado anteriormente.

Estudio de la multicapa PEDOT y copolímero PEDOT-PNMPy con interfase nanoporosa

Una vez ejecutado el experimento de manera duplicada de los diferentes films (tabla 1), se realizan los cálculos con respecto a la viabilidad de generación y caracterización del copolímero.

Los cálculos provenientes de las ciclovoltamperometrías son los siguientes: la pérdida de electroactividad y la capacitancia específica según ec. 3.1. y ec. 3.2, respectivamente. Los resultados obtenidos se muestran en la tabla 8.

Tabla 8: Resumen de los resultados de LEA y SC en el ciclo 2 y 5 para cada film. [Fuente: Propia]

	Multicapa	Q (C) PEDOT	Q (C) COPOLIMERO	LEA (%)	SC 2 (F/g)	SC 50 (F/g)
Film 1	PEDOT/COP/NaCl/COP/PEDOT	0,55	0,2	55,51	83,73	37,25
Film 3			0,4	38,19	67,36	41,64
Film 5			0,55	47,53	125,61	65,91
Film 7			0,7	44,51	92,26	51,20
Film 9			0,9	65,83	129,68	44,32
Film 2	PEDOT/COP/poro/COP/PEDOT	0,55	0,2	60,23	47,34	18,83
Film 4			0,4	33,50	35,68	23,73
Film 6			0,55	45,59	50,65	27,56
Film 8			0,7	-	-	-
Film 10			0,9	-	-	-

Los resultados representados en la tabla 8, están comprendidos desde el ciclo número dos y el último ciclo, el número cincuenta.

Con los films generados con una carga superior e igual de 0,7 e interfase nanoperforada (films 8 y 10) no se ejecutaron los ensayos de ciclovoltamperometrías y cronopotenciometrías ya que, a la hora de la disolución de la sal, se cuartearon las muestras, debido a la naturaleza del copolímero. Por esta razón no existen datos experimentales de estos films. Se puede observar en la siguiente figura:



Figura 23: Film 8. Capas del copolímero a una carga de 0,7 y interfase nanoperforada cuarteadas. [Fuente: propia].

Con respecto al porcentaje LEA resultante, a pesar que el porcentaje es conveniente que sea el menor valor posible, a medida que aumenta el número de ciclo incrementa el porcentaje hasta acabar el ensayo de ciclovoltamperometría, donde la mitad de los resultados se encuentran por encima del 50%. Sin embargo, si se compara copolímeros sintetizados con la misma carga, el porcentaje de LEA se asemejan entre ellos en los dos diferentes con interfase nanoperforada y con la sal.

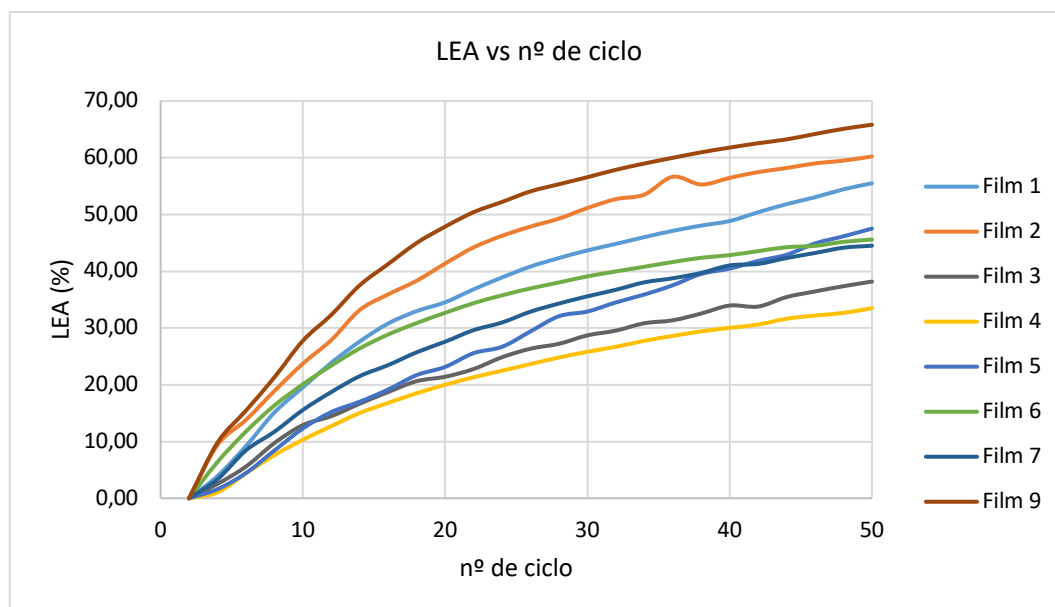


Figura 24: Evolución de la pérdida de electroactividad con respecto al número de ciclos. Los films 1,3,5,7 y 9 corresponden a capas de polímeros generados con sales, con una carga del copolímero de 0.2, 0.4, 0.55, 0.7 y 0.9, respectivamente. Los films 2, 4 y 6 corresponden a capas de polímeros generados con interfase nanoperforada, con una carga del copolímero de 0.2, 0.4 y 0.55, respectivamente. [Fuente: propia].

Mientras, la capacitancia específica calculada es conveniente que sea un valor alto, porque se puede traducir como la cantidad de electricidad almacenada que tiene el polímero, propiedad que se busca optimizar. Se obtienen resultados bajos en la SC del ciclo cincuenta en comparación con la SC del ciclo dos, pero se puede observar que en el conjunto de films generados con la interfase nanoperforada a mayor carga del copolímero mayor SC en el ciclo 50 y en cambio los films con la sal, existe mayor SC en el ciclo 50 cuando se realiza con una carga media. La comparación de la capacitancia específica entre los dos ciclos se muestra a continuación:

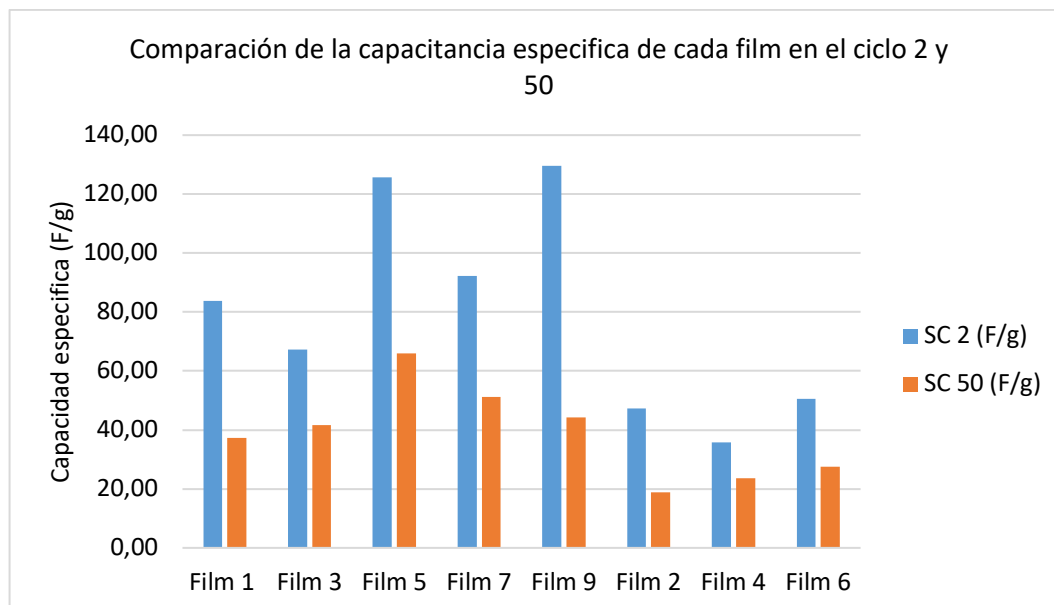


Figura 25: Comparación entre SC de los ciclos 2 y 50. Los films 1,3,5,7 y 9 corresponden a capas de polímeros generados con sales, con una carga del copolímero de 0.2, 0.4, 0.55, 0.7 y 0.9, respectivamente. Los films 2, 4 y 6 corresponden a capas de polímeros generados con interfase nanoperforada, con una carga del copolímero de 0.2, 0.4 y 0.55, respectivamente. [Fuente: Propia].

Por último, en relación a los datos de ciclovoltamperometría, se grafica la carga acumulada de cada film ensayado con respecto al número de ciclo de la ciclovoltamperometría y el resultado es que a medida que avanza el número de ciclos esta disminuye esta carga, se muestra en la figura 28.

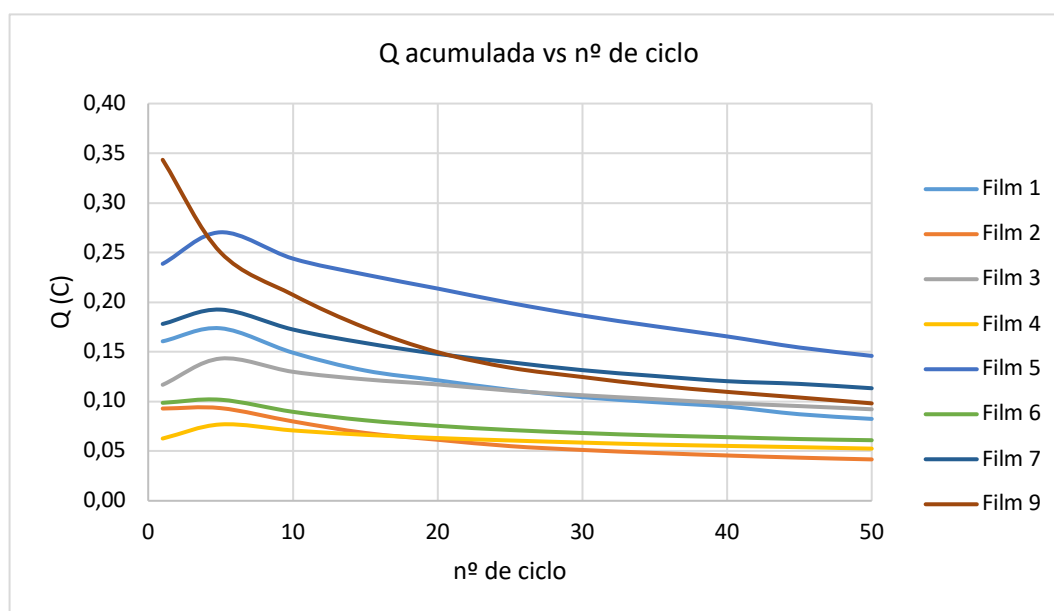


Figura 26: Gráfico de la carga acumulada con respecto a los ciclos ensayados. Los films 1,3,5,7 y 9 corresponden a capas de polímeros generados con sales, con una carga del copolímero de 0.2, 0.4, 0.55, 0.7 y 0.9, respectivamente. Los films 2, 4 y 6 corresponden a capas de polímeros generados con interfase nanoperforada, con una carga del copolímero de 0.2, 0.4 y 0.55, respectivamente. [Fuente: propia].

Se obtiene el siguiente gráfico una vez realizadas las cronopotenciometrías de los diferentes films:

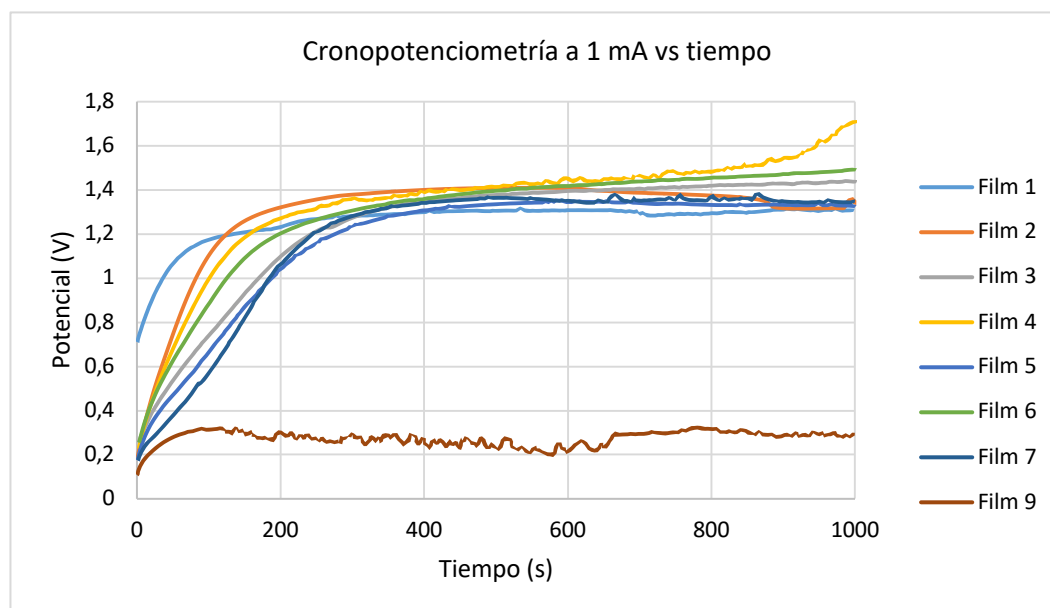


Figura 27: Cronopotenciometría a 1 mA con respecto al tiempo ($t=1000$). Los films 1,3,5,7 y 9 corresponden a capas de polímeros generados con sales, con una carga del copolímero de 0.2, 0.4, 0.55, 0.7 y 0.9, respectivamente. Los films 2, 4 y 6 corresponden a capas de polímeros generados con interfase nanoperforada, con una carga del copolímero de 0.2, 0.4 y 0.55, respectivamente. [Fuente: propia]

Se puede observar que existe una tendencia con respecto al potencial resultante de las cronopotenciometrías, la mayoría de los films se encuentran en un potencial entre 1,2 V y 1,6 V, exceptuando el film 9, a simple vista se puede apreciar que no es un resultado dentro de los parámetros normales, posiblemente se deba a que existan roturas en el electrodo a nivel superficial.

Detección de los neurotransmisores con los sensores multicapa

En este apartado se exponen los resultados obtenidos con el sensor de detección de neurotransmisores, tanto cualitativos como cuantitativos, para cada una de las sustancias estudiadas por separado y de forma conjunta.

Se lleva a cabo las detecciones en los rangos concentraciones de los neurotransmisores de 0 μM y 100 μM mediante una ciclovoltamperometría de 5 ciclos.

7.1.1. Detección de la dopamina

7.1.1.1. Sensor 1: PEDOT (1s) / PNMPy (3s)/ p / PNMPy (3s) / PEDOT (3s).

Se realiza la detección de dopamina con el sensor conformado por PEDOT y PNMPy tal y como se explica en el método experimental, y se grafica el segundo ciclo de las ciclovoltamperometrías de las diferentes concentraciones. El resultado es el siguiente:

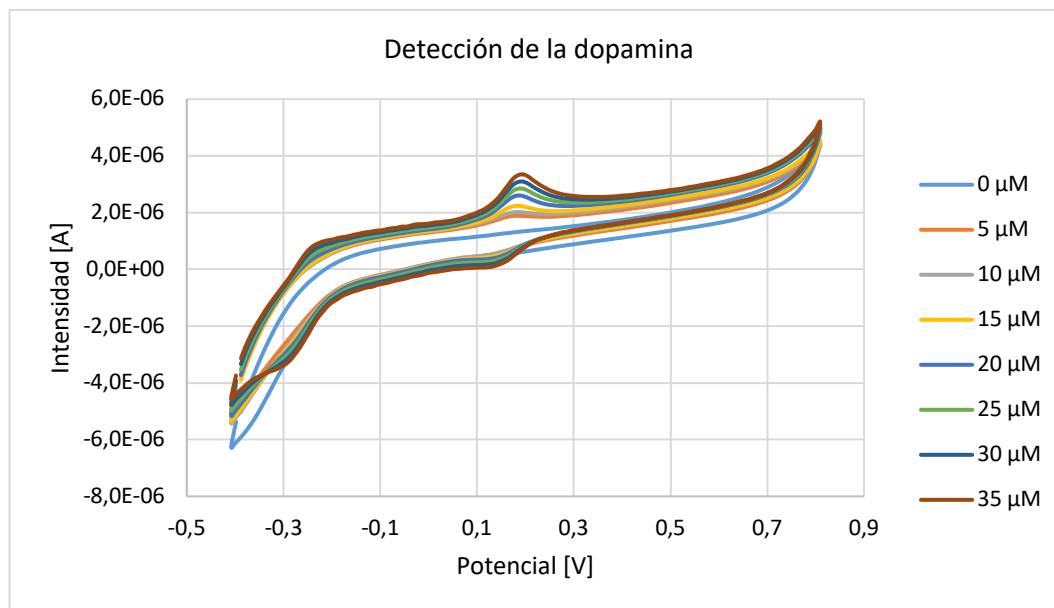


Figura 28: Gráfico de detección de dopamina en el rango de 0-35 μM en el sensor 1. [Fuente: propia]

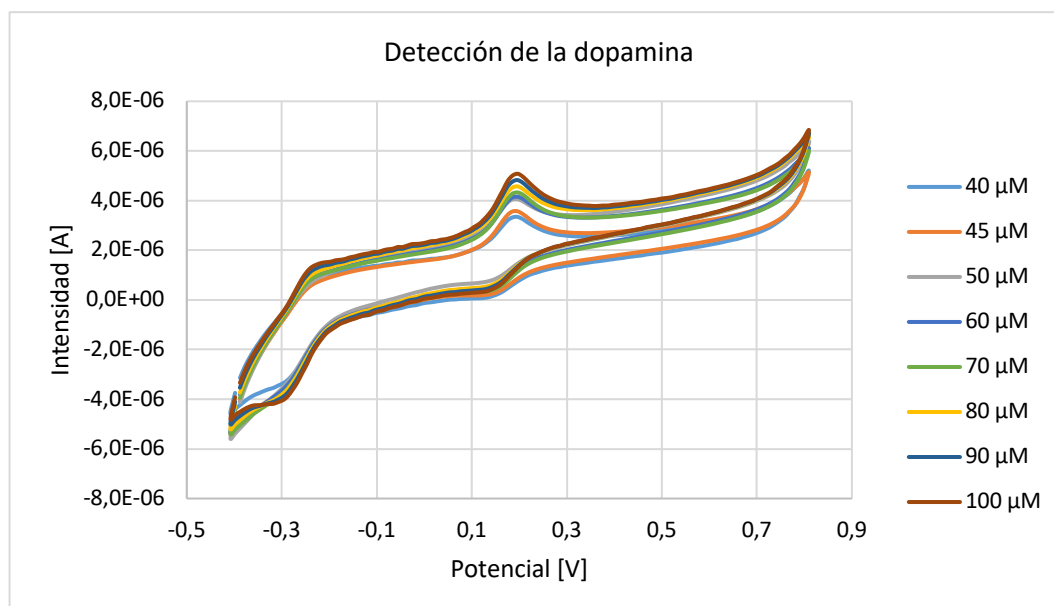


Figura 29: Gráfico de detección de dopamina en el rango de 40-100 μM en el sensor 1. [Fuente: propia]

Se observa la aparición de un pico anódico entre 0.1 V y 0.3 V, que aumenta en consonancia a las adiciones de la solución dopamina, este pico coincide con el potencial de detección de los estudios anteriores al departamento IMEM [5]. Con la intensidad del pico se obtiene la recta intensidad versus concentración de dopamina que se muestra a continuación:

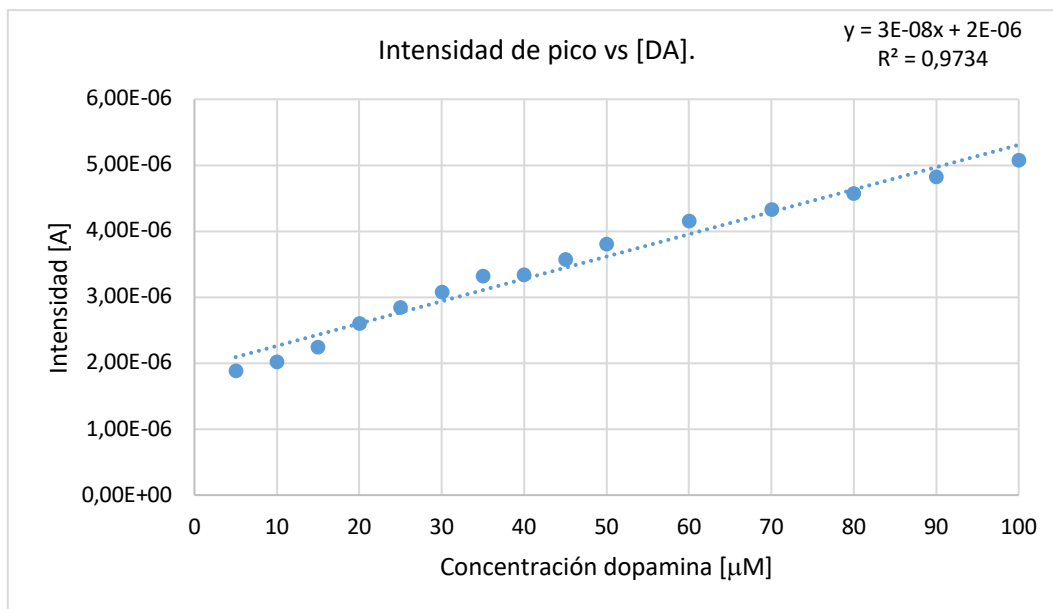


Figura 30: Intensidad de pico con respecto a la concentración del sensor conformado por PEDOT y PNMPy. [Fuente: propia].

Se obtiene un modelo de regresión lineal con coeficiente de correlación de 0,9734 y una ecuación:

$$I = 3,387 E^{-08} [DA] + 1,922 E^{-06} \quad (\text{Ec.7.1})$$

Se lleva a cabo el método experimental para la determinación del límite de detección de dopamina de este sensor y se utiliza una ciclovoltamperometría de cinco ciclos.

Sin embargo, para la correcta determinación, se filtran los datos experimentales y se trata solo el rango de tiempo donde ocurre el pico de intensidad de la detección. Además, se realiza la derivada de la intensidad con respecto al tiempo ($\frac{\partial I}{\partial t}$), es decir, la pendiente de la intensidad con respecto al diferencial de tiempo ($\frac{\Delta I}{\Delta t}$) de cada punto de este rango, así poder acentuar más el primer pico de intensidad y facilitar la localización de este límite de detección. Se representa gráficamente a continuación:

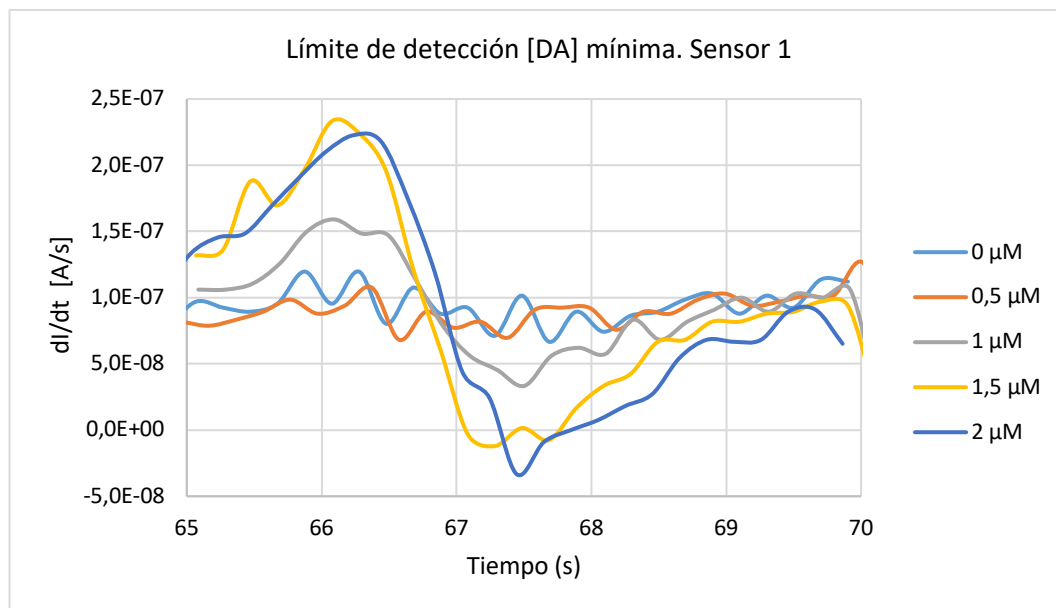


Figura 31: Representación gráfica de la derivada de la intensidad con respecto al tiempo para el límite de detección de dopamina en el sensor conformado por PEDOT y PNMPy. [Fuente: propia].

Se puede comprobar visualmente en la figura 33 que existe a partir de 1 μM el primer pico de intensidad, y observar el pico muy pronunciado de las concentraciones de 1,5 y 2 μM .

Se realiza el estudio de la pérdida de electroactividad en el rango de concentraciones de dopamina estudiado en los diferentes ciclos y se obtiene el siguiente gráfico:

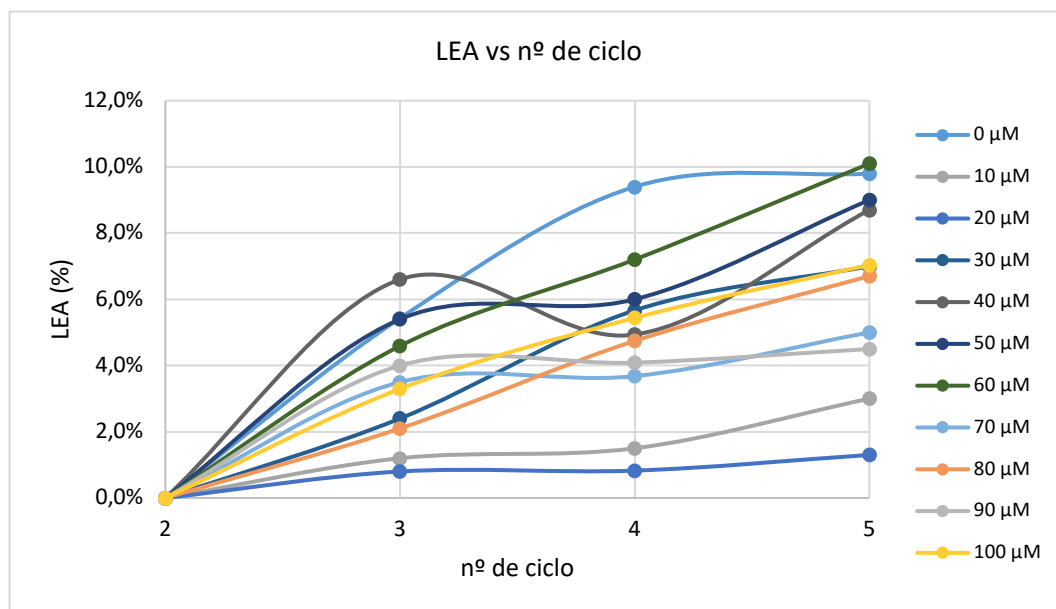


Figura 32: Porcentaje de pérdida de electroactividad del sensor 1 con respecto al número de ciclo en la detección de dopamina. [Fuente: propia].

En cuanto a la figura 34 se puede identificar gráficamente que la pérdida de electroactividad oscila entre 1,5 – 10% aproximadamente.

7.1.1.2. Sensor 2: PEDOT (1s) /COP (3s) /p/COP (3s) /PEDOT (3s)

Se lleva a cabo la detección de dopamina con el sensor conformado por PEDOT y copolímero tal y como se explica en el método experimental, se ilustra utilizando una gráfica el segundo ciclo de las ciclovoltamperometrías de las diferentes concentraciones. El resultado se muestra a continuación:

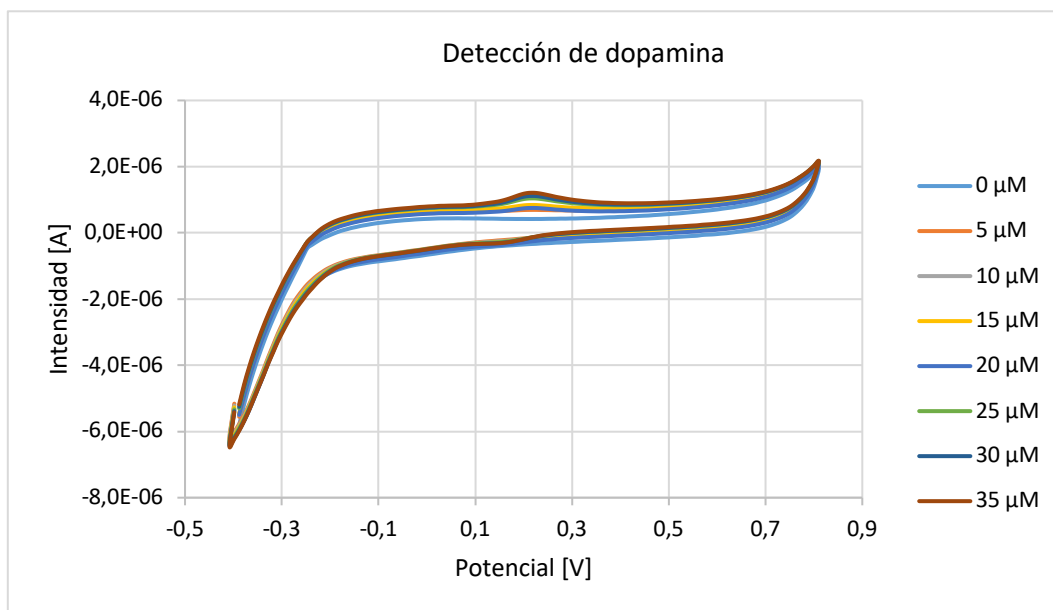


Figura 33: Gráfico de detección de dopamina en el rango de 0-35 μM en el sensor 2. [Fuente: propia]

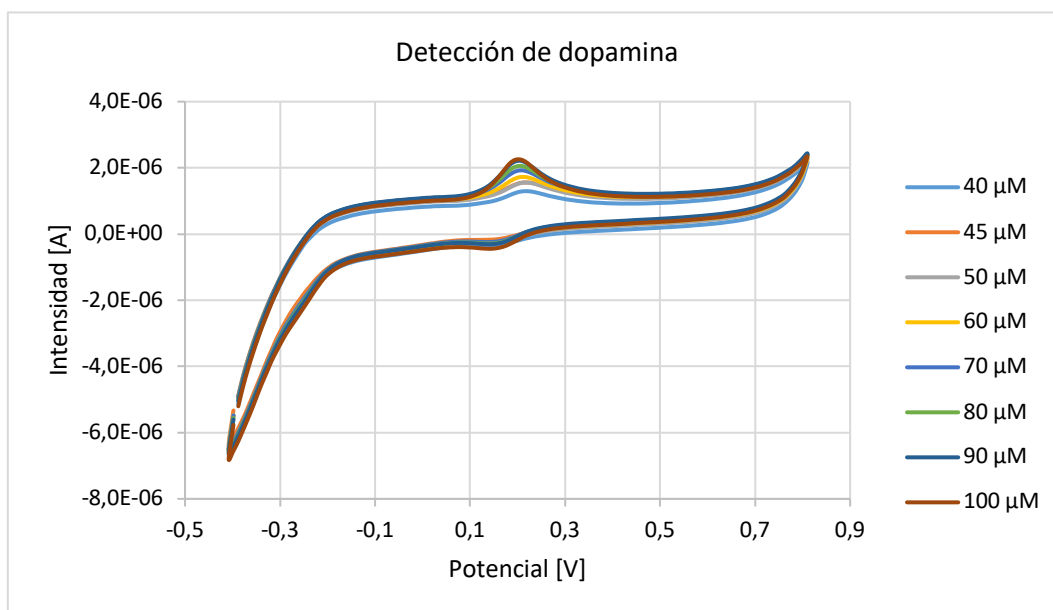


Figura 34: Gráfico de detección de dopamina en el rango de 40-100 μM en el sensor 2. [Fuente: propia]

En esta ocasión también se observa la aparición de un pico anódico alrededor de 0,2 V, este pico coincide con el potencial de detección de los estudios anteriores al departamento IMEM [5]. que aumenta en consonancia a las adiciones de la solución dopamina. Con estos datos se obtiene la recta intensidad versus concentración de dopamina que se muestra a continuación:

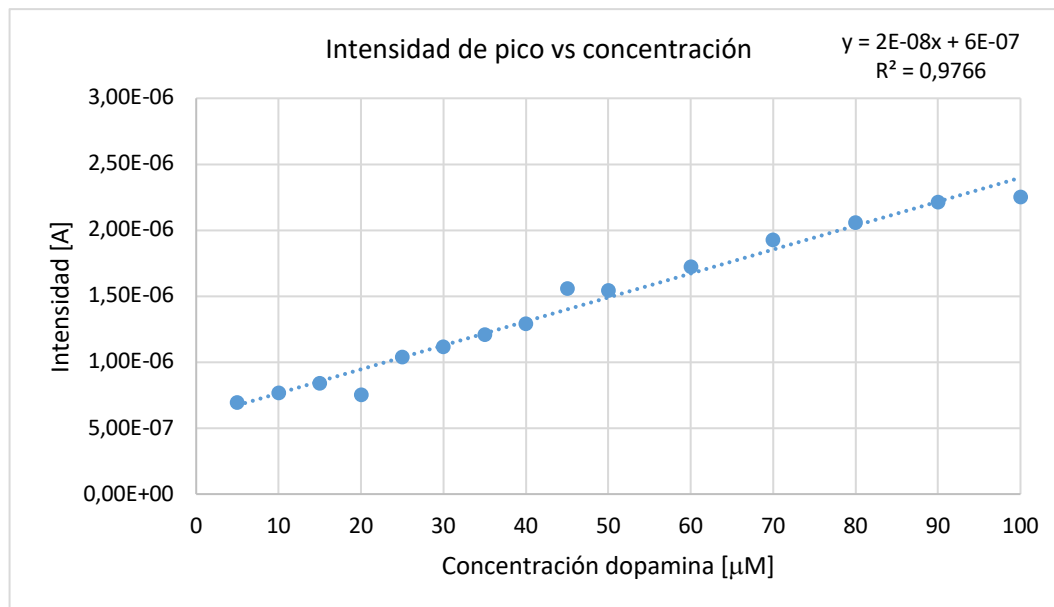


Figura 35: Intensidad de pico con respecto a la concentración del sensor 2. [Fuente: propia].

Se obtiene de la gráfica de la figura 37 una regresión lineal con un coeficiente de correlación de 0,9766 y la siguiente ecuación:

$$I = 1,82 \text{ E}^{-08} [\text{DA}] + 5,826 \text{ E}^{-07} \quad (\text{Ec.7.2})$$

Se ejecuta el procedimiento para determinar el límite de detección, se escoge de los datos experimentales resultantes aquellos que estén comprendidos en donde aparece el primer pico de intensidad de la detección de dopamina, además se realiza la derivada de la intensidad con respecto al tiempo para facilitar la localización del primer pico de intensidad. El gráfico de la derivada de los datos experimentales es el siguiente:

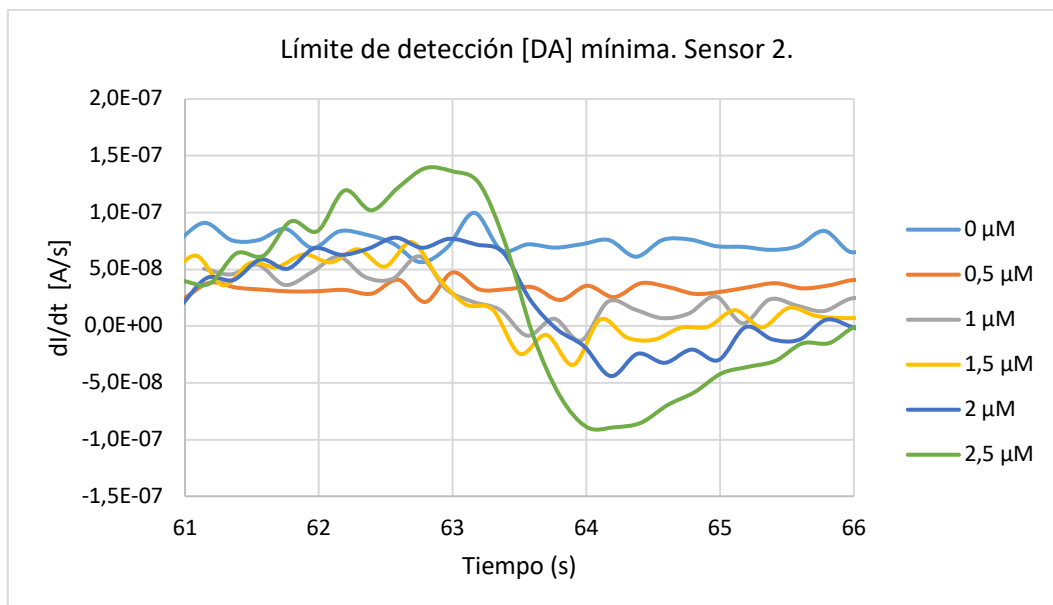


Figura 36: Representación gráfica de la derivada de la intensidad con respecto al tiempo para el límite de detección de dopamina en el sensor conformado por el copolímero. [Fuente: propia].

Se puede diferenciar en la figura 38 que a partir de 1 μM se encuentra el primer pico de intensidad y poco a poco en las siguientes adiciones aumenta su amplitud.

El porcentaje de LEA según el número de ciclo de detección del sensor de PEDOT-COP se muestra a continuación:

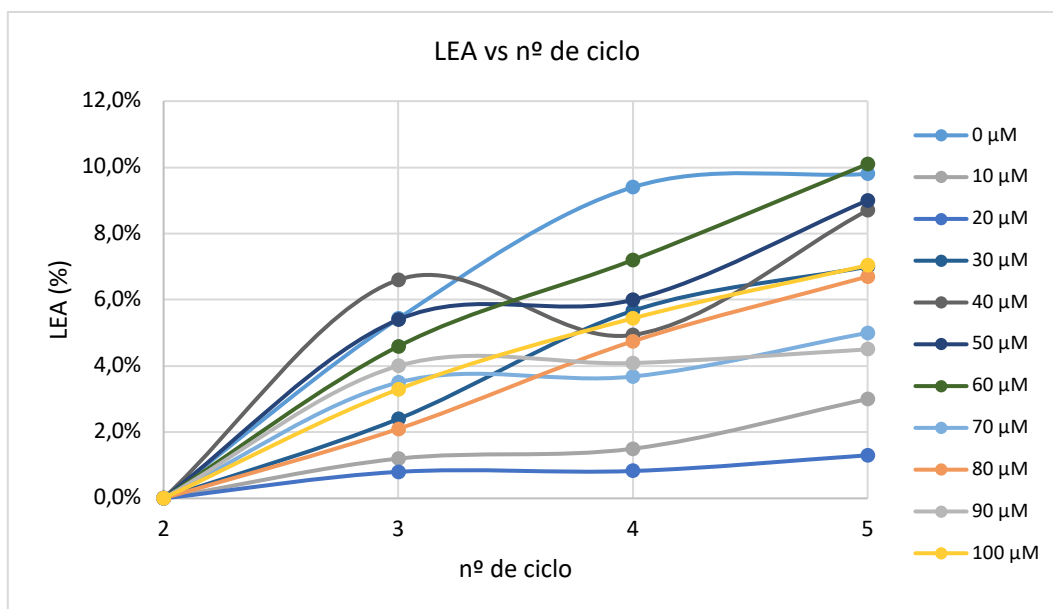


Figura 37: Porcentaje de pérdida de electroactividad del sensor 2 con respecto al número de ciclo en la detección de dopamina. [Fuente: propia].

Por lo que se refiere a la pérdida de electroactividad del sensor (figura 39) se encuentra cada concentración en el intervalo de 1,6-10%. Además, se puede observar que en comparación al estudio del copolímero y los resultados de LEA de la tabla 8, existe una disminución considerable del porcentaje, esto es debido a que después del envejecimiento y el uso de ella causa un desgaste de la multicapa.

A la vista de los resultados que se obtienen, con respecto a la detección con los dos sensores se observa que la conformación multicapa con mejor coeficiente de correlación es la del sensor de PEDOT-PNMPy ($R^2 = 0,9734$).

7.1.2. Detección de la serotonina

7.1.2.1. Sensor 1: PEDOT (1s) / PNMPy (3s)/ p / PNMPy (3s) / PEDOT (3s)

Se realiza la detección de serotonina con el sensor conformado por PEDOT y PNMPy, se grafica el segundo ciclo de las ciclovoltamperometrías de las diferentes concentraciones. El resultado es el siguiente:

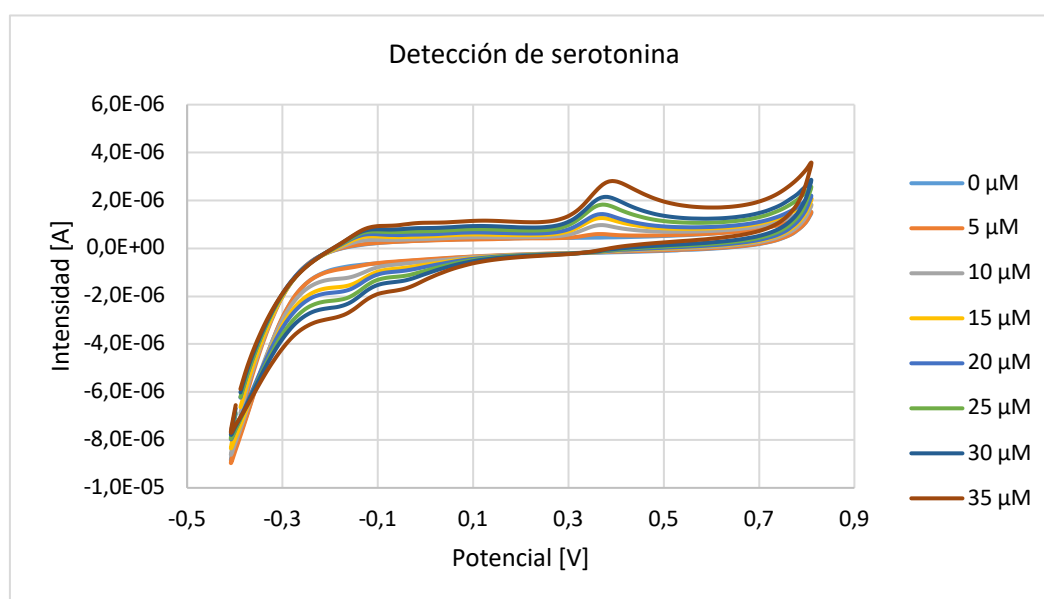


Figura 38: Gráfico intensidad versus potencial para la detección de serotonina en el rango de 0-35 μM en el sensor 1. [Fuente: propia]

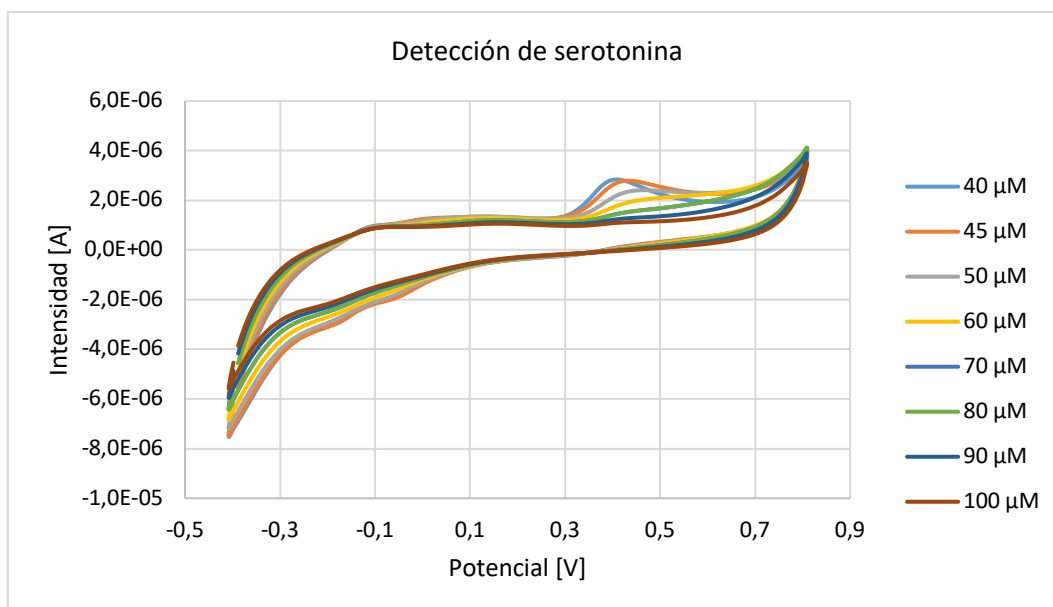


Figura 39: Gráfico intensidad versus potencial para la detección de serotonina en el rango de 40-100 μM en el sensor 1. [Fuente: propia]

Se identifica un pico anódico entre 0,3 V y 0,5 V, correspondiente a las concentraciones de serotonina. No obstante, se observa que a partir de la concentración 40-45 μM la pronunciación del pico comienza a disminuir. Se realiza la gráfica de intensidad de pico versus la concentración de dopamina para analizar el punto exacto de la disminución de la intensidad de pico.

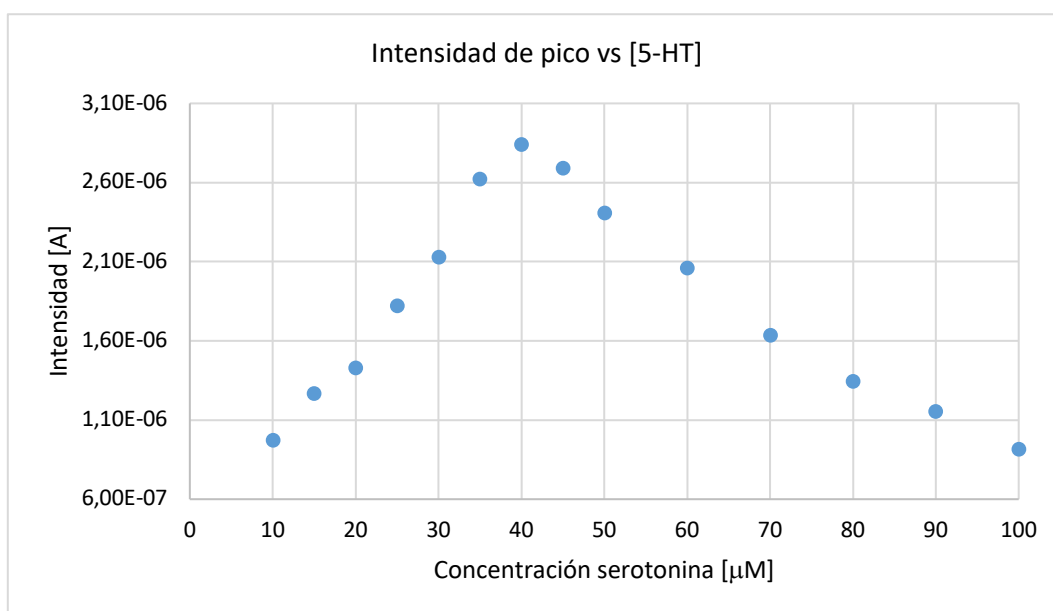


Figura 40: Intensidad de pico con respecto a la concentración del sensor 1. [Fuente: propia].

A través de la figura 42, se puede examinar que el pico máximo de intensidad que se traduce como la detección de la serotonina, es cuando la concentración es igual a 40 μM . Después de esta concentración poco a poco va disminuyendo.

Debido a la limitación de detección, se busca encontrar una solución efectiva, y se produce un nuevo sensor manteniendo las nanoporaciones y las tres primeras capas, pero cambiando la última capa de PEDOT que se genera durante 4 segundos, ya que este es de quien depende la capacitancia específica. Imitando la solución a un problema parecido de la bibliografía [6].

7.1.2.1.1 Nueva versión del sensor 2: PEDOT (1s) / PNMPy (3s) / p / PNMPy (3s) / PEDOT (4s)

Se vuelve a realizar la detección de la serotonina con la nueva versión del sensor y se obtienen datos experimentales donde se realiza la gráfica intensidad de pico versus concentración de serotonina. Se muestra a continuación la comparación de los picos de intensidad entre los dos sensores (original y nueva versión):

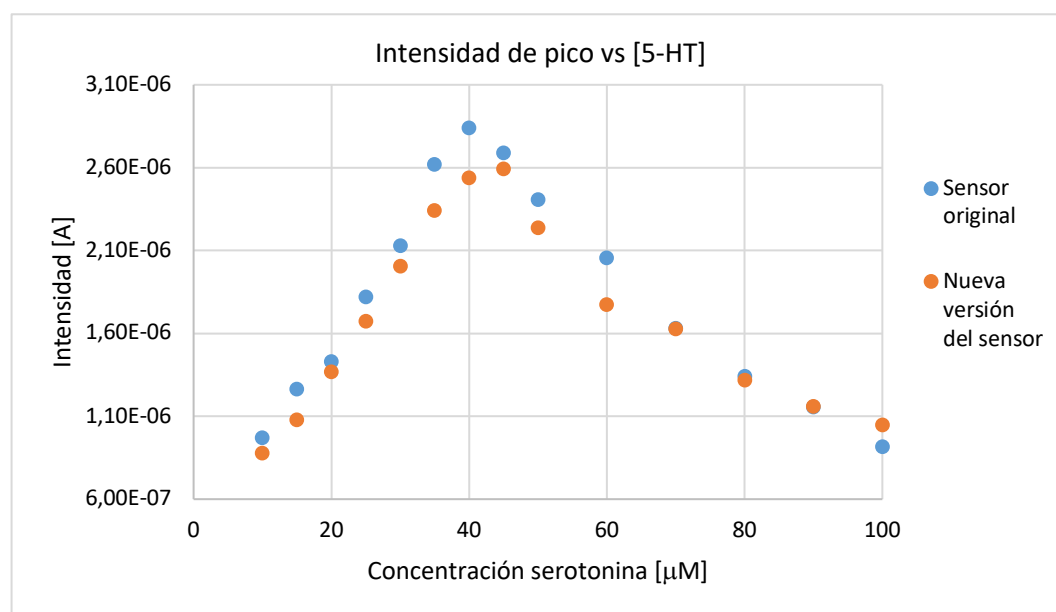


Figura 41: Intensidad de pico con respecto a la concentración de los sensores 1 original y nueva versión. [Fuente: Propia].

Sin embargo, en la figura 43 se observa que una vez ejecutado todas las ciclovoltamperometrías a cada concentración se obtiene la misma tendencia que la primera versión del sensor, es decir, la detección a partir de cierta concentración comienza a disminuir los picos de intensidades. La intensidad de pico más alta con la nueva versión de este sensor se encuentra en una concentración de 45 μM .

Por esta razón, solo se trabaja dentro del rango de una concentración comprendida entre 0-45 μM . Se realiza la gráfica de intensidad de pico versus la concentración de serotonina para elaborar un modelo de regresión lineal.

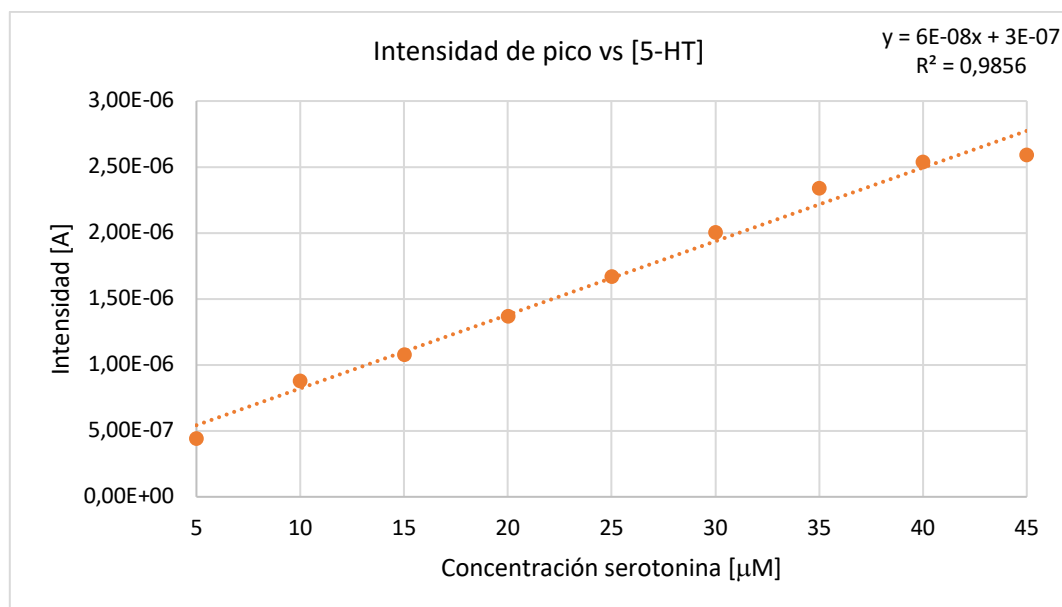


Figura 42: Modelo de regresión con respecto a la intensidad versus la concentración de serotonina de la nueva versión del sensor 1. [Fuente: propia].

Se obtiene un modelo de regresión lineal con coeficiente de correlación de 0,9856 y una ecuación:

$$I = 5,578 \text{ E}^{-08} [5 - \text{HT}] + 2,638 \text{ E}^{-07} \quad (\text{Ec.7.3})$$

Se lleva a cabo la determinación del límite de detección de este nuevo sensor ya que el rango de detección es superior al sensor original y el modelo tiene una R^2 alta, y se llevan a cabo las detecciones de los límites mínimos y máximos en los rangos del sensor. Una vez ejecutado todas las ciclovoltamperometrías de detección, se filtran los datos experimentales comprendidos en el intervalo de intensidad de pico de la serotonina. Para facilitar la identificación del primero pico y el último pico se realiza la pendiente de la intensidad con respecto al tiempo. Los gráficos obtenidos se muestran a continuación:

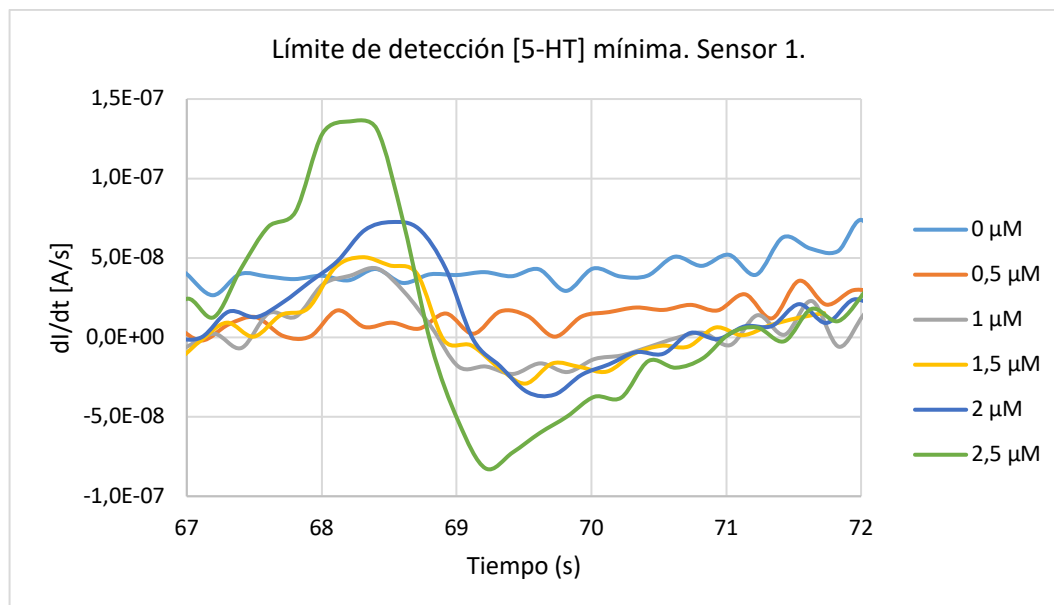


Figura 43: Representación gráfica de la derivada de la intensidad con respecto al tiempo para el límite de detección de concentración mínima de serotonina en el sensor conformado por PNMPy. [Fuente: propia].

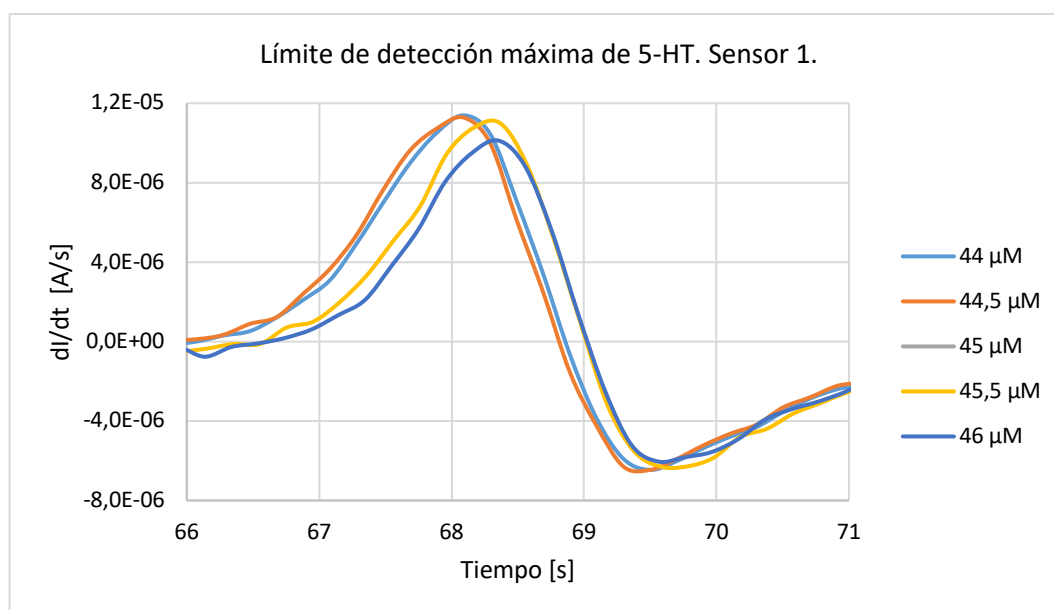


Figura 44: Representación gráfica de la derivada de la intensidad con respecto al tiempo para el límite de detección de concentración máxima de serotonina en el sensor conformado por PNMPy. [Fuente: propia].

Se pueden distinguir visualmente en la figura 45 y 46, la concentración mínima detectable es cuando la concentración es 1 μM y la concentración máxima detectable es en 45 μM .

Con respecto al porcentaje de LEA, se representa gráficamente según los ciclos de cada concentración. Se muestra a continuación:

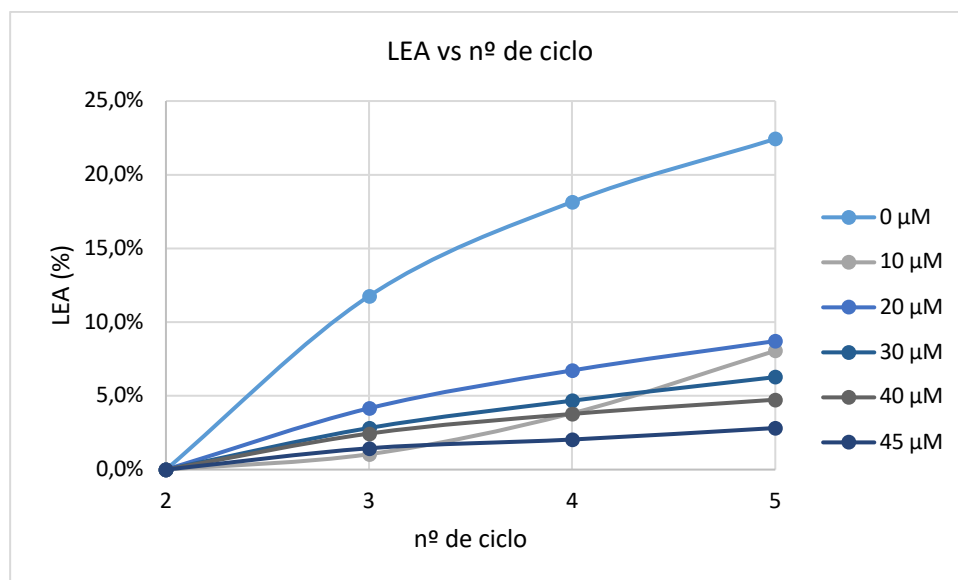


Figura 45: Porcentaje de pérdida de electroactividad del sensor 1 con respecto al número de ciclo en la detección de serotonina. [Fuente: propia].

Según se distingue en la figura 47 el porcentaje de pérdida de electroactividad se encuentra en un intervalo de 0,8-23%, que en comparación del sensor 1 utilizado en la detección de la dopamina es un poco mas elevado. Sin embargo, se puede detallar la disminución del porcentaje de LEA a medida que se más utiliza el sensor multicapa.

7.1.2.2. Sensor 2: PEDOT (1s) /COP (3s) /p/COP (3s) /PEDOT (3s)

Se realiza la detección de serotonina con el sensor 2 de PEDOT y copolímero, se grafica el tercer ciclo de las ciclovoltamperometrías de cada concentración. El resultado es el siguiente:

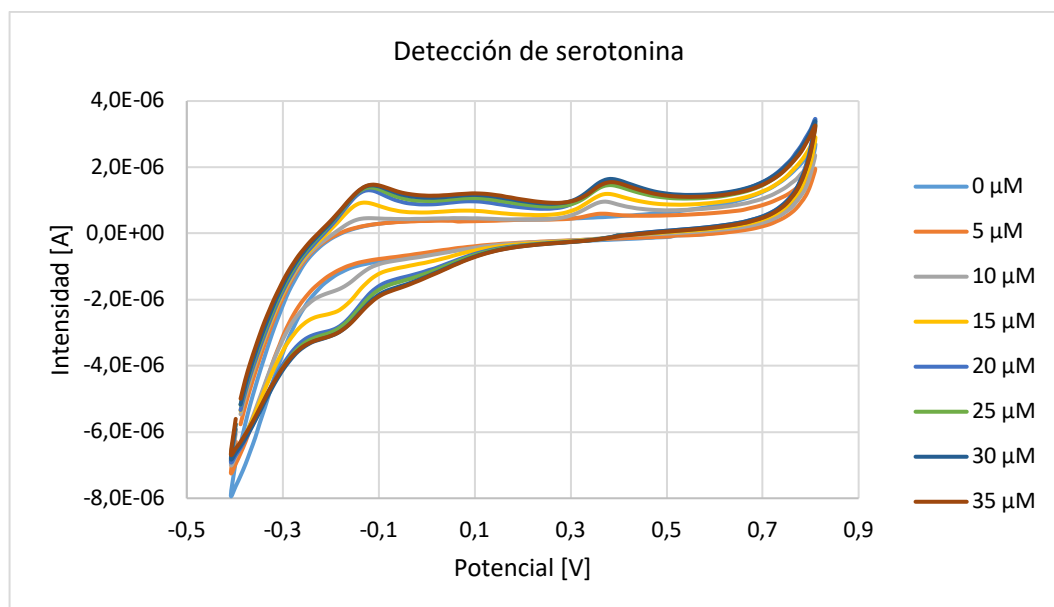


Figura 46: Gráfico intensidad vs potencial para la detección de serotonina en el rango de 0-35 μM en el sensor 2. [Fuente: propia]

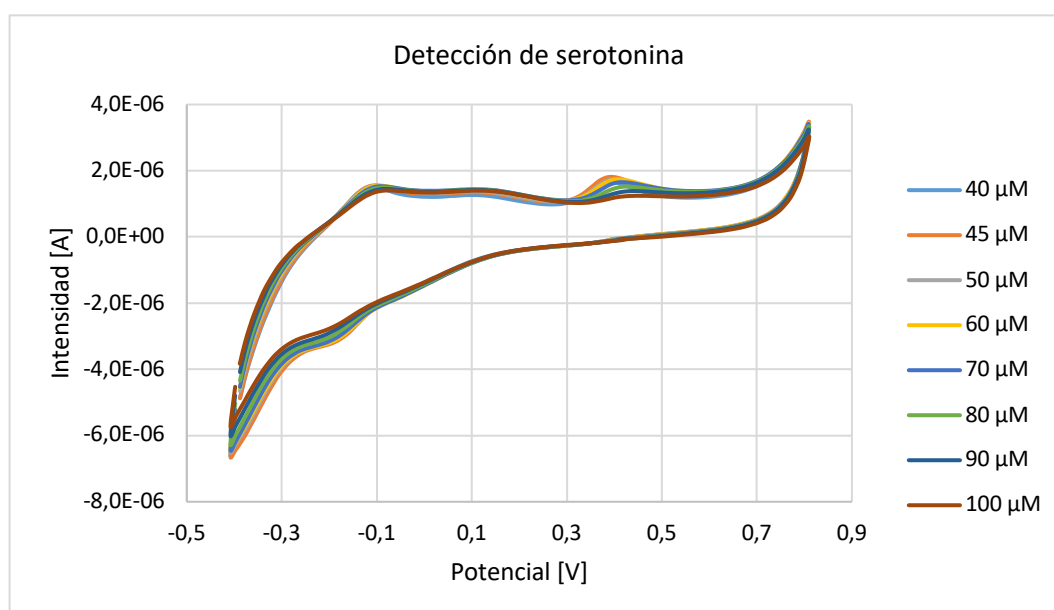


Figura 47: Gráfico intensidad vs potencial para la detección de serotonina en el rango de 40-100 μM en el sensor 2. [Fuente: propia]

Se puede observar un pico anódico entre 0,3 V y 0,5 V, este corresponde a la detección de la serotonina, pero que a partir 40-45 μM de serotonina comienza una disminución de la intensidad de este pico. Se realiza la grafica de la intensidad de pico versus la concentración para confirmar la disminución del pico.

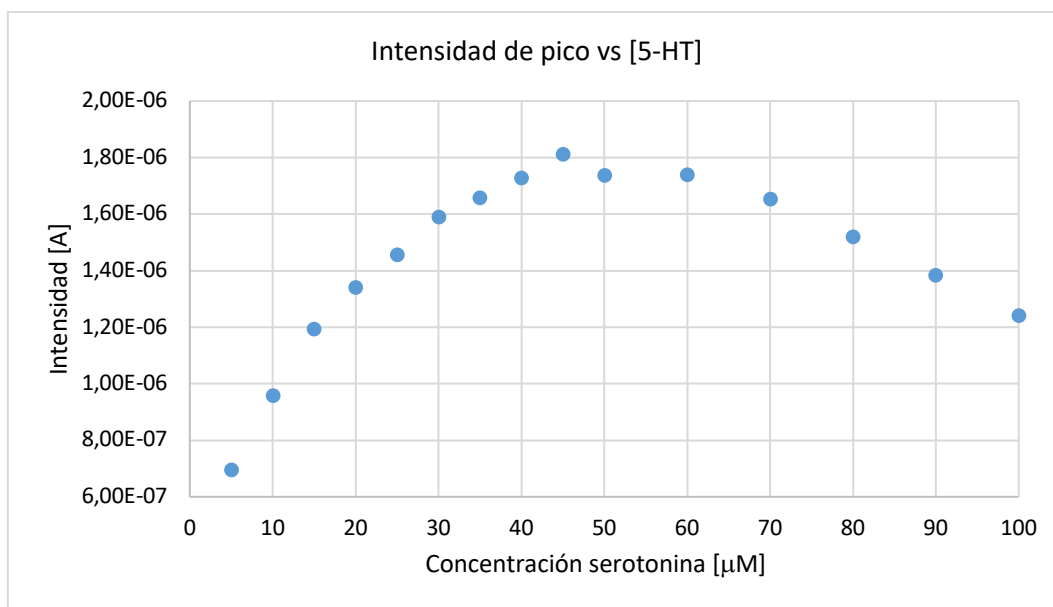


Figura 48: Intensidad de pico con respecto a la concentración del sensor 2. [Fuente: propia].

En la figura 45 se detalla que la intensidad de pico, y se observa que a partir de la concentración de 45 μM el sensor deja de detectar la serotonina, disminuyendo paulatinamente la intensidad de pico.

Se busca una solución para lograr que el sensor detecte concentraciones superiores a 45 μM , se produce un nuevo sensor manteniendo las nanoporosidades y las tres primeras capas iguales, pero cambiando la última capa de PEDOT que se genera durante 4 segundos, ya que este es de quien depende la capacitancia específica. Imitando a una solución bibliográfica [6].

7.1.2.2.1 Nueva versión del sensor 2: PEDOT (1s) /COP (3s) /p/COP (3s) /PEDOT (4s)

Se vuelve a realizar la detección de la serotonina, pero se utiliza la nueva versión del sensor y se obtienen datos experimentales donde se realiza la gráfica intensidad de pico versus concentración de serotonina. Se muestra a continuación:

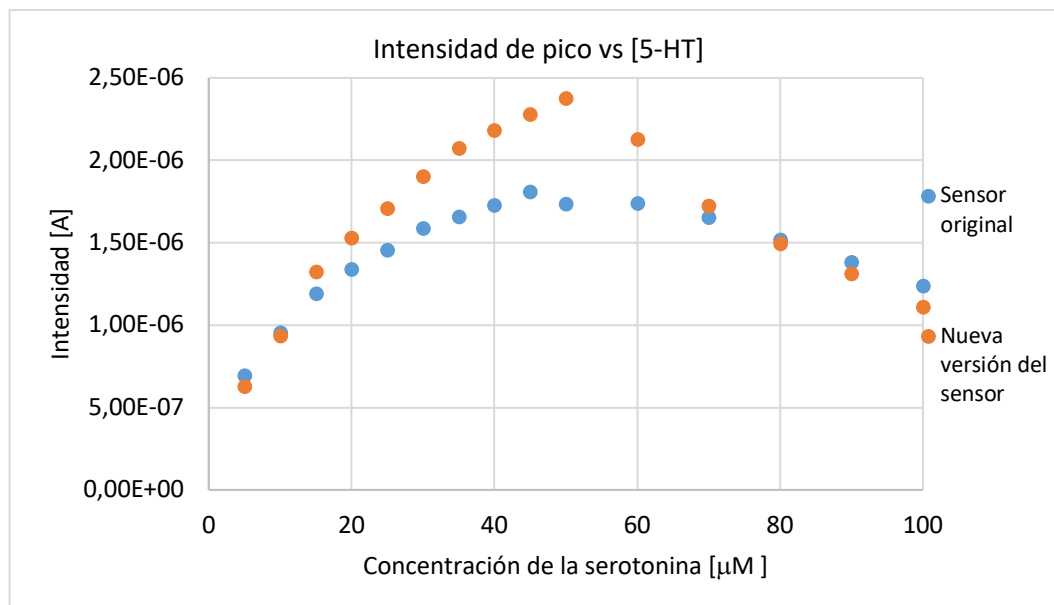


Figura 49: Intensidad de pico con respecto a la concentración de los sensores 2 original y nueva versión. [Fuente: Propia].

No obstante, como se puede observar en la figura 46 se obtuvo un resultado similar, y la intensidad de pico más alta es en 50 μM . Por este motivo se realiza la gráfica de intensidad de pico versus la concentración de serotonina para elaborar un modelo de regresión lineal, dentro del rango 0-50 μM , donde detecta la serotonina este nuevo sensor.

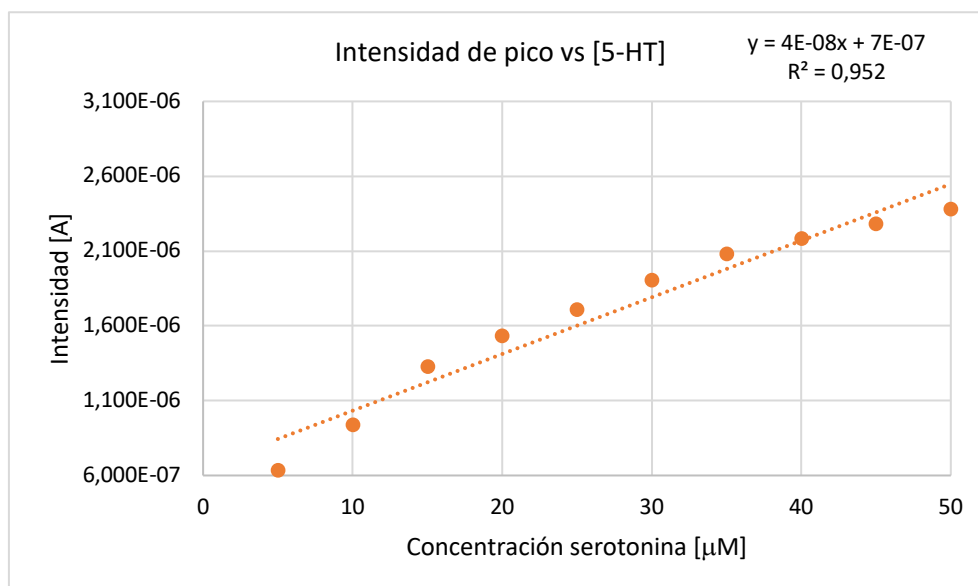


Figura 50: Intensidad de pico con respecto a la concentración del sensor 2 en el rango de detección. [Fuente: propia].

Se obtiene un modelo de regresión lineal con coeficiente de correlación de 0,952 y una ecuación:

$$I = 3,787E^{-08} [5 - HT] + 6,543E^{-07} \quad (\text{Ec.7.4})$$

Se realiza el límite de detección de este nuevo sensor conformado por el copolímero debido que el rango de detección es superior al sensor original. Se llevan a cabo las detecciones de los límites mínimos y máximos en los rangos del sensor. Acabadas las ciclovoltamperometrías de detección, se filtran los datos experimentales comprendidos en el intervalo de intensidad de pico de la serotonina. Además, se realiza la pendiente de la intensidad con respecto al tiempo. Los gráficos obtenidos se muestran a continuación:

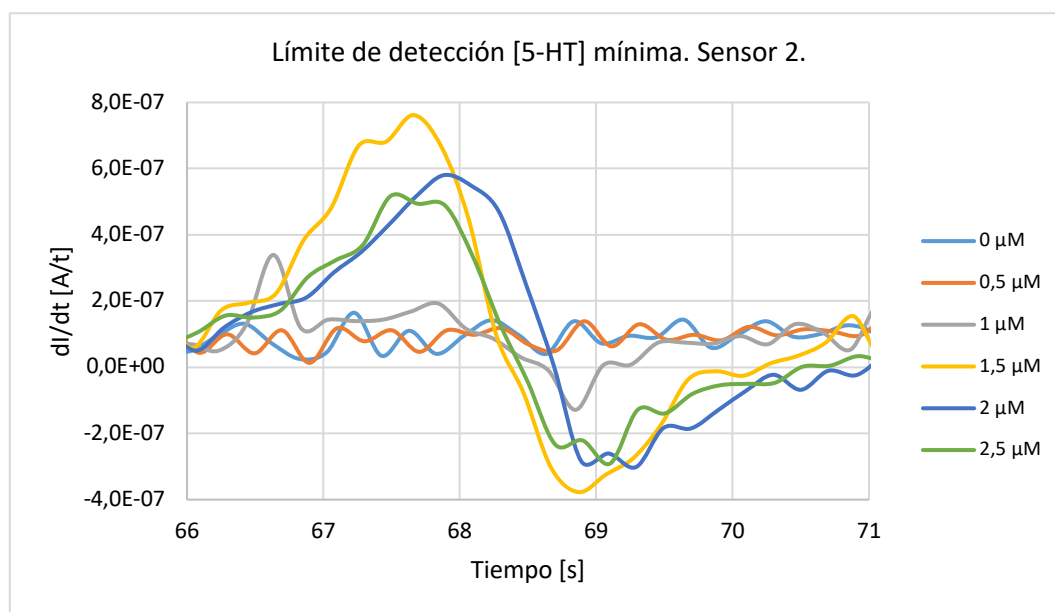


Figura 51: Representación gráfica de la derivada de la intensidad con respecto al tiempo para el límite de detección de concentración mínima de serotonina en el sensor conformado por el copolímero. [Fuente: propia].

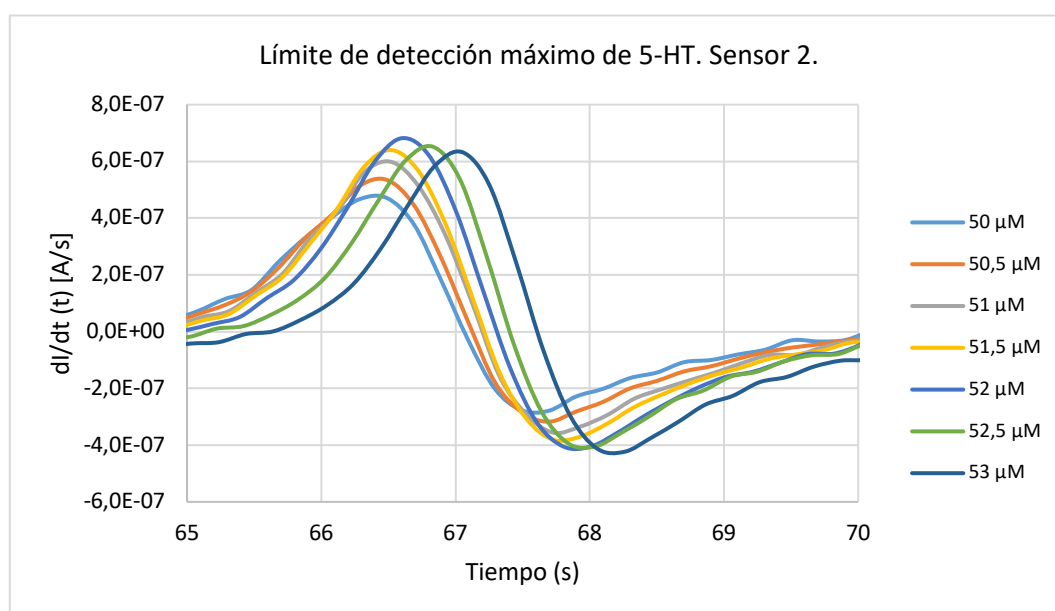


Figura 52: Representación gráfica de la derivada de la intensidad con respecto al tiempo para el límite de detección de concentración máxima de serotonina en el sensor conformado por el copolímero. [Fuente: propia].

A través de la gráfica se puede observar rápidamente que el intervalo de detección de serotonina del sensor conformado por el copolímero se encuentra en concentraciones comprendidas entre $1\text{-}52\mu\text{M}$. Ya que son los dos puntos donde se encuentran el primer pico de intensidad y el pico más alto.

Con lo que respecta al porcentaje de LEA, se grafica según el ciclo de cada ciclovoltamperometría de detección de la serotonina a diferentes concentraciones con el sensor:

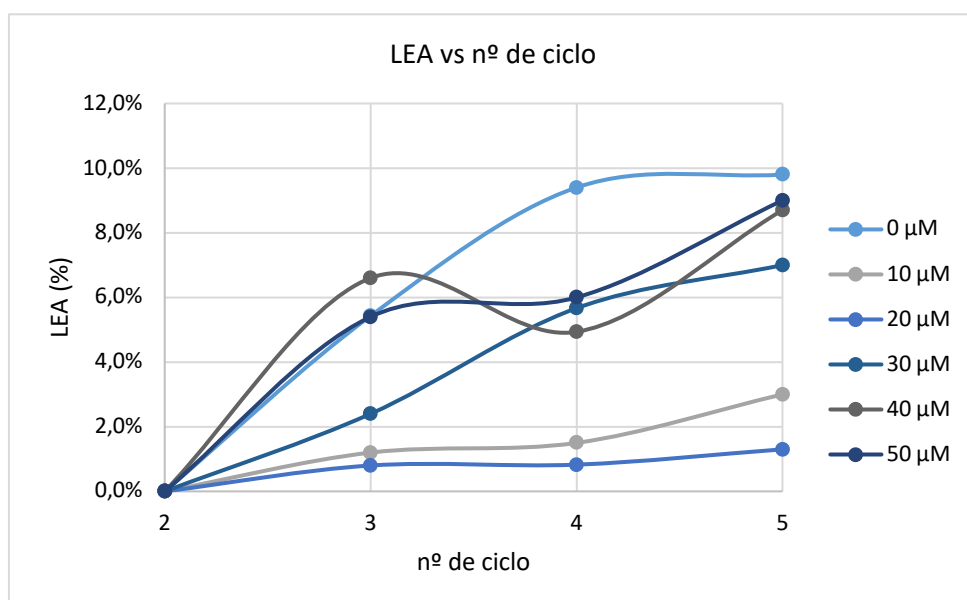


Figura 53: Porcentaje de pérdida de electroactividad del sensor 2 con respecto al número de ciclo en la detección de serotonina. [Fuente: propia].

Según la figura 55, el resultado de LEA oscila entre el 1,8-10%. Si se compara con los resultados de la tabla 8, donde se estudia el copolímero, se observa una disminución considerable en el porcentaje final de la pérdida de electroactividad, esto es debido al envejecimiento previo del sensor.

Una vez analizado cada resultado con respecto a la detección de la serotonina dentro de los rangos que funciona, se observa que la conformación del nuevo sensor de PEDOT-PNMPY tiene un mejor coeficiente de correlación, de 0,9856.

7.1.3. Detección simultánea de los neurotransmisores

Se lleva a cabo la detección simultánea de ambos neurotransmisores con las nuevas versiones de los sensores, ya que estos tienen un rango de trabajo con serotonina más amplio, para el sensor formado por PEDOT-PNMPy es $0\text{-}45\mu\text{M}$ y el sensor formado por PEDOT-copolímero es de $0\text{-}50\mu\text{M}$.

Se realizan primero las detecciones con las concentraciones de dopamina y serotonina iguales, posteriormente dopamina en presencia de 35 μM de serotonina y por último serotonina en presencia de 35 μM de dopamina.

7.1.3.1. Neurotransmisores a concentraciones iguales.

Con respecto a la detección de dopamina y serotonina con adiciones iguales, las gráficas del segundo ciclo de ciclovoltamperometría de las diferentes concentraciones en los dos sensores son las siguientes:

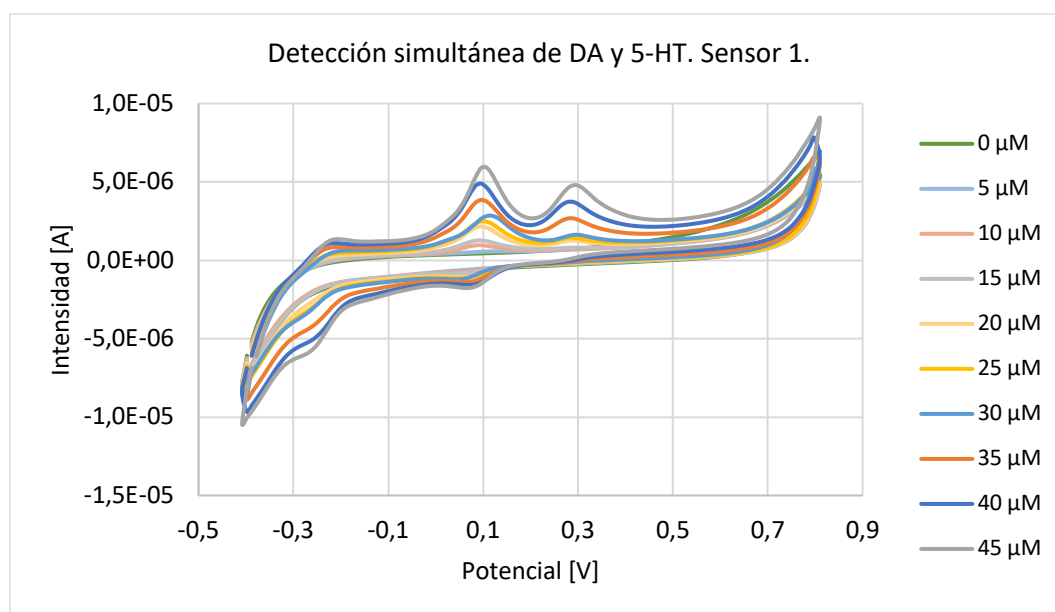


Figura 54: Gráfico intensidad vs potencial para la detección simultánea en el rango de 0-45 μM en el sensor 1. [Fuente: propia].

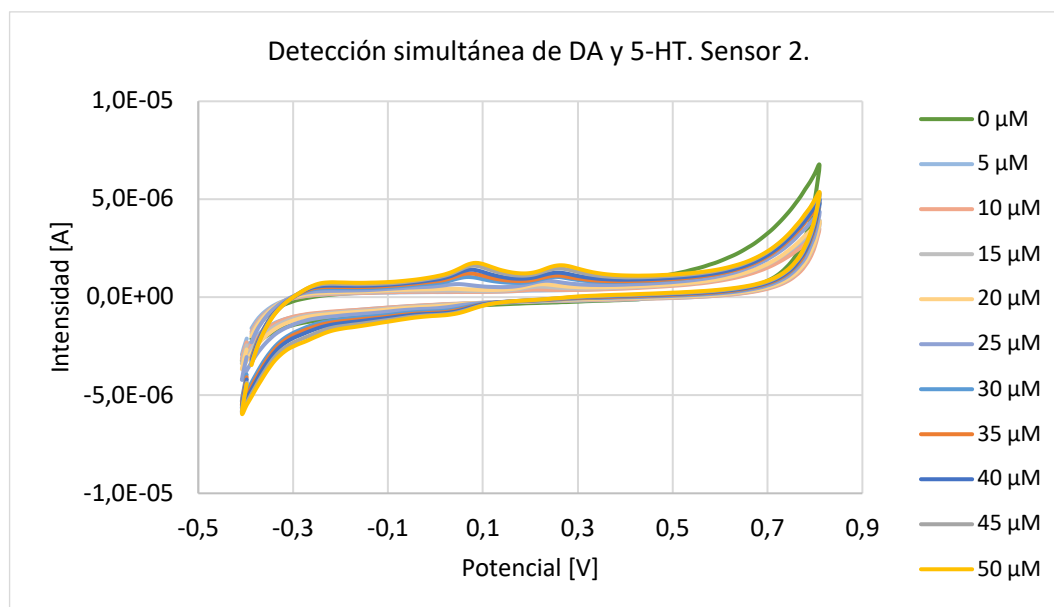


Figura 55: Gráfico intensidad vs potencial para la detección simultánea en el rango de 0-50 μM en el sensor 2. [Fuente: propia].

Se puede observar en las figuras 52 y 53 dos picos anódicos con un potencial diferente para cada uno de ellos, es decir, no existe un solapamiento entre ellos y permite la detección simultánea de cada neurotransmisor.

A partir de estos datos se realizan las gráficas de la intensidad de pico versus la concentración de cada sensor para comparar con los modelos de regresión resultantes con respecto a la detección individual de cada neurotransmisor.

La gráfica y el modelo de regresión correspondiente para cada sensor son los siguientes:

- Nueva versión del sensor 1, conformado por PEDOT/PNMPy.

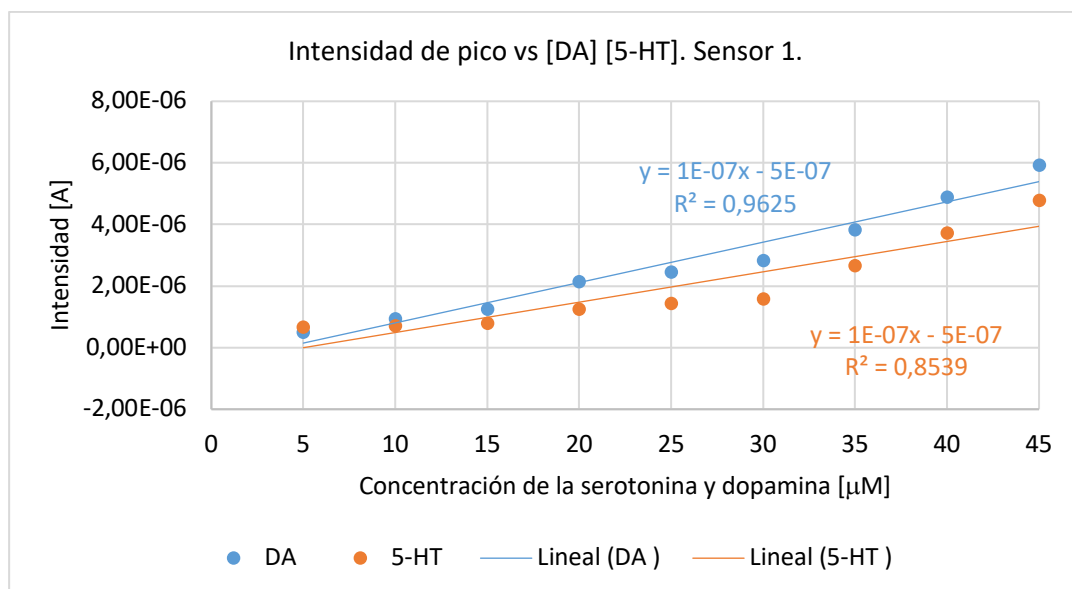


Figura 56: Intensidad de pico con respecto a la concentración del sensor 1 conformado por PEDOT-PNMPy en el rango de detección. [Fuente: propia].

Se puede observar en la figura 54 que los picos de intensidad coinciden en concentraciones bajas y sucesivamente comienza su distanciamiento, siendo la dopamina la de mayores picos. Además, se obtienen las siguientes ecuaciones de las rectas de regresión:

Para la dopamina:

$$I = 1,311E^{-07} [DA] + 5,067E^{-07} \quad (\text{Ec.7.5})$$

Donde el coeficiente de correlación es de 0,963, un poco menor que el de la detección individual de la dopamina con este sensor.

Para la serotonina:

$$I = 9,857E^{-08} [5 - HT] - 4,944E^{-07} \quad (\text{Ec.7.6})$$

Donde el coeficiente de correlación es de 0,854, que en comparación del modelo de regresión de la detección de serotonina sola con este sensor es muchísima mas pequeña.

- Nueva versión del sensor 2, conformado por PEDOT/copolímero.

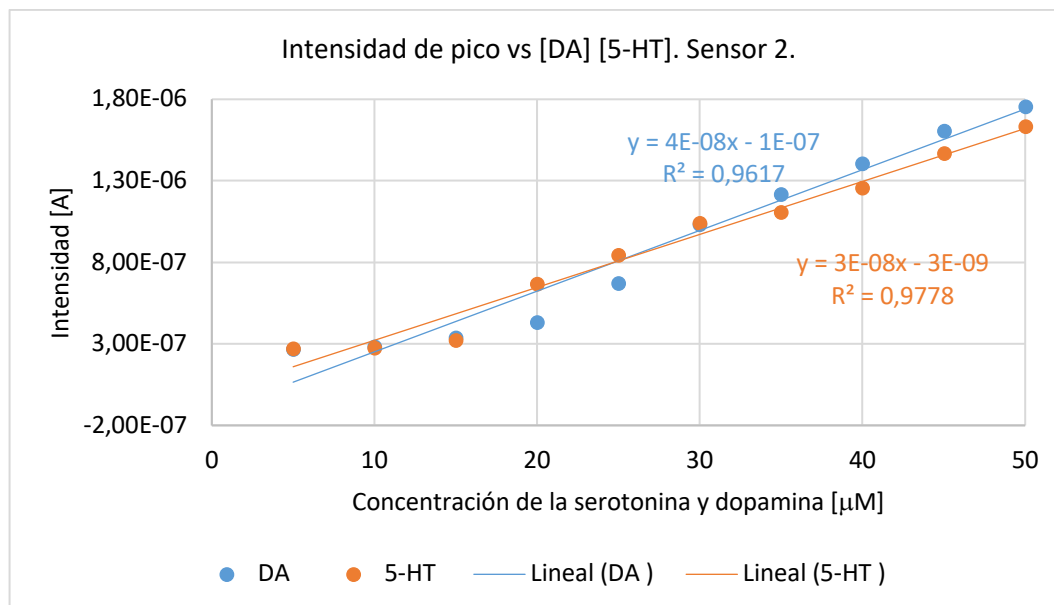


Figura 57: Intensidad de pico con respecto a la concentración del sensor 1 conformado por PEDOT-Copolímero en el rango de detección. [Fuente: propia].

En la figura 55, se puede distinguir que ambos neurotransmisores tienen similar intensidad de pico a las diferentes concentraciones.

Para la dopamina, se obtiene un coeficiente de correlación de 0,962 y la siguiente ecuación:

$$I = 3,723 \text{ E}^{-08} [\text{DA}] - 1,211 \text{ E}^{-07} \quad (\text{Ec.7.7})$$

Para la serotonina, el coeficiente de correlación es de 0,978 y la siguiente ecuación:

$$I = 3,247 \text{ E}^{-08} [5 - \text{HT}] - 2,828 \text{ E}^{-09} \quad (\text{Ec.7.8})$$

De las ecuaciones 7.7 y 7.8 se puede confirmar lo que se ha mencionado de la similitud con la pendiente de cada recta, ambas son muy parecidas. Además, de obtener R^2 mejores y similares que la detección individual con el sensor de PEDOT/copolímero.

Una vez analizados los resultados de la detección simultánea de ambos neurotransmisores, se observa que la multicapa formada por el copolímero tiene en los modelos de regresión mejor coeficiente de correlación.

7.1.3.2. Detección de dopamina en serotonina constante

Como se ha comentado en las gráficas de figuras 56 y 57, se puede realizar la detección de ambos neurotransmisores. Es por esta razón que además se detecta la concentración de dopamina en

presencia de serotonina con concentración constante de 35 μM , dentro del rango de detección de la serotonina.

Para la simplificación de los gráficos y facilitar la interpretación de los resultados, se compara el modelo resultante de regresión lineal de la dopamina que se obtiene en este ensayo con los anteriores, tanto de la detección individual como simultánea.

La gráfica comparativa y el modelo de regresión correspondiente a todas las detecciones de dopamina para cada sensor son los siguientes:

- Nueva versión del sensor 1, conformado por PEDOT/PNMPy.

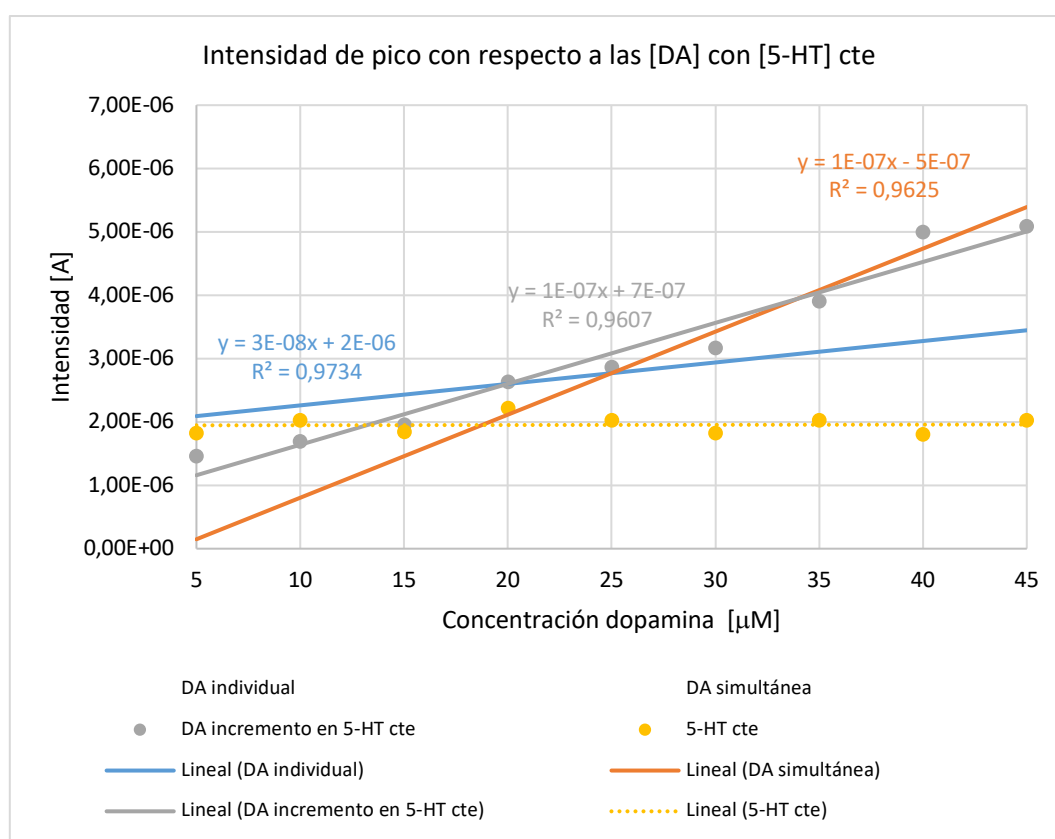


Figura 58: Gráfico comparativo de las intensidades de pico con respecto a las concentraciones del sensor 1 conformado por PEDOT-PNMPy en el rango de detección. [Fuente: propia].

Se puede decir que el modelo de regresión lineal de este ensayo tiene el coeficiente de correlación más bajo con un valor de 0,961, pero también el pico de intensidad coincide en la concentración de dopamina correspondiente a la 20 μM en todos los modelos. Otro punto importante es que la pendiente formada por la regresión de los puntos de detección simultánea (naranja) y la detección de DA en incremento y 5-HT cte (gris), es similar. Por último, el modelo de regresión de la detección de DA sigue siendo el mejor (azul).

Con respecto a la serotonina detectada en el ensayo, se mantiene en una intensidad de pico constante correspondiente a 35 μM (amarilla).

- Nueva versión del sensor 2, conformado por PEDOT/copolímero.

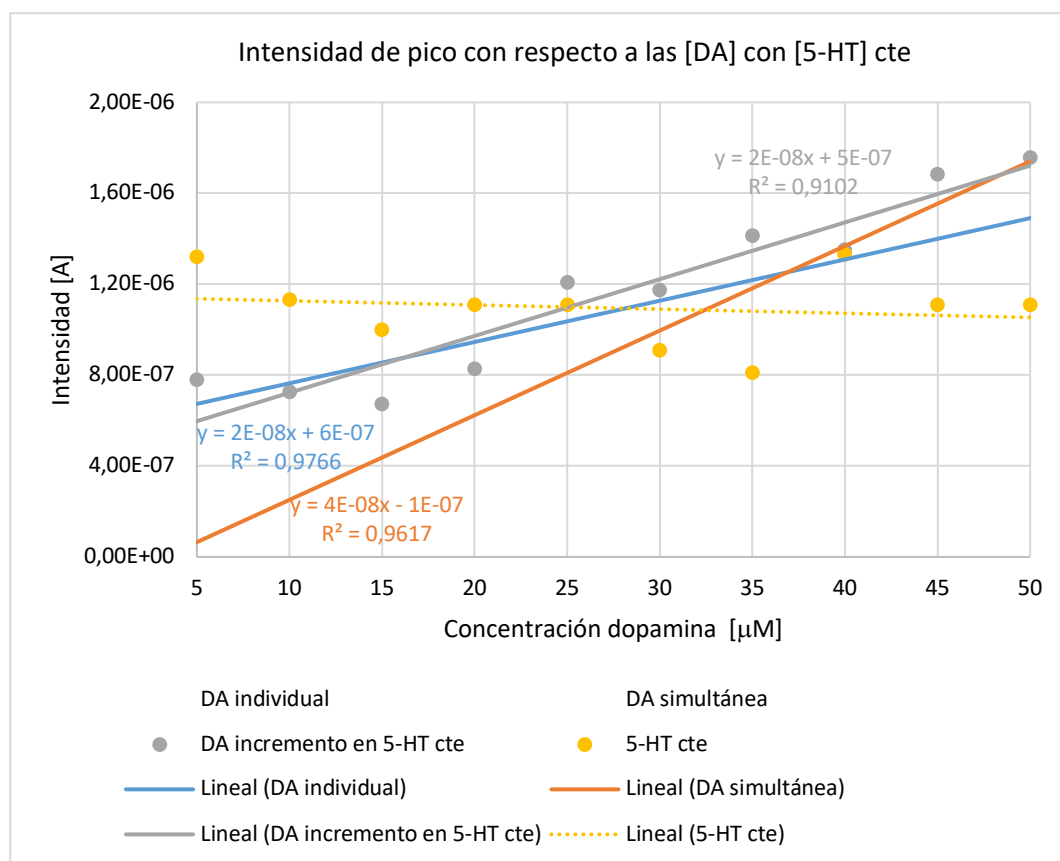


Figura 59: Gráfico comparativo de las intensidades de pico con respecto a las concentraciones del sensor 2 conformado por PEDOT-Copolímero en el rango de detección. [Fuente: propia].

En la figura 61, se puede observar que la última detección de DA con 5-HT cte (gris) sigue imita la trayectoria de los dos anteriores ensayos que contienen dopamina. Igualmente, el modelo con mejor aproximación a los datos reales continúa siendo la detección de dopamina de manera individual (azul). Pero las tres detecciones coinciden de manera similar en la detección de dopamina a partir de la concentración de 30 μM .

Con respecto a la serotonina detectada en las ciclovoltamperometrías se mantiene en una intensidad de pico constante (amarilla).

7.1.3.3. Detección de serotonina en dopamina constante

En las figuras 56 y 57 se comenta la posibilidad de la detección simultánea de ambos neurotransmisores. Se detecta la concentración de serotonina en presencia de dopamina con una concentración constante de 35 μM , dentro del rango de detección de la serotonina.

Se comparan los diferentes modelos de regresión lineal de 5-HT en esta detección con las realizadas anteriormente, tanto de manera individual como de manera simultánea.

La gráfica comparativa y el modelo de regresión correspondiente a todas las detecciones de dopamina para cada sensor son los siguientes:

- Nueva versión del sensor 1, conformado por PEDOT/PNMPy.

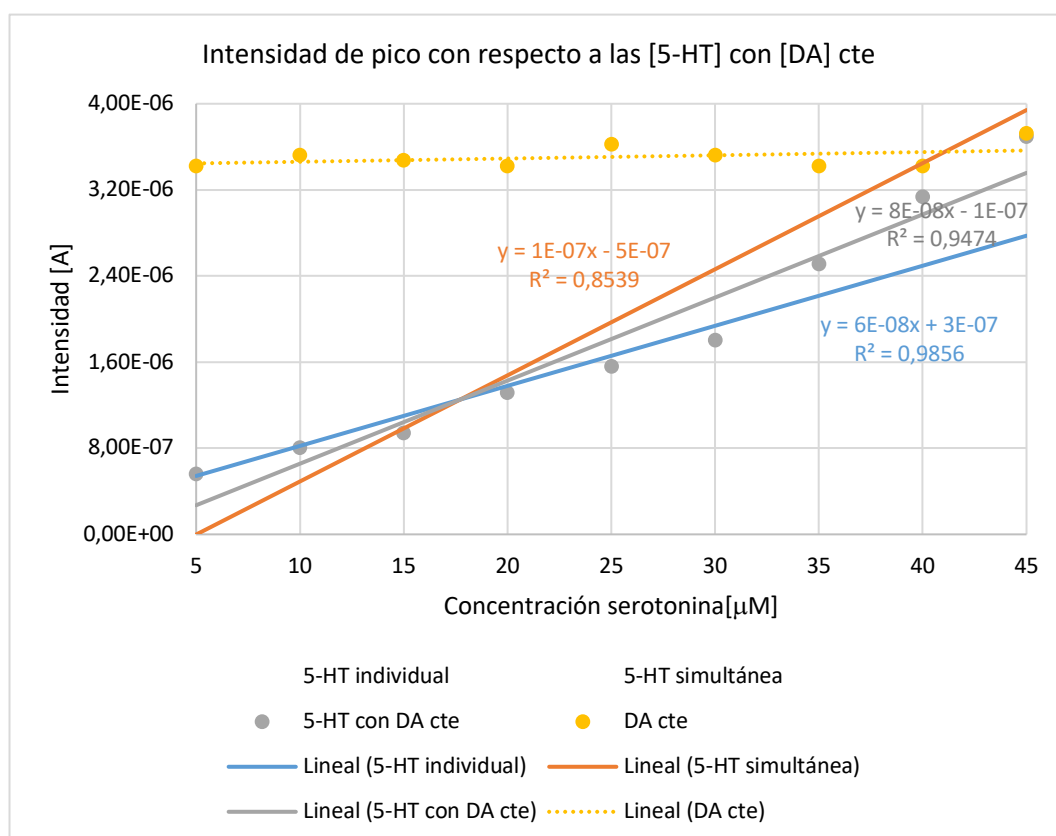


Figura 60: Comparación de las intensidades de pico con respecto a las concentraciones del sensor 2 conformado por PEDOT-Copolímero en el rango de detección. [Fuente: propia].

Se observa en la gráfica de la figura 62, el modelo de la última detección realizada con el sensor para 5-HT en DA cte (gris) sigue la tendencia de detección de las dos anteriores (azul y naranja), se encuentra justo por el medio. Se distingue que esta última no tiene una R^2 tan alta como lo es la detección de la serotonina individual con el sensor (azul).

Con respecto a la detección en esta última, la dopamina se mantiene constante en el pico de detección correspondiente (amarilla). Además, se observa que las intensidades de pico de la dopamina se encuentran por encima de todas las diferentes de la serotonina.

- Nueva versión del sensor 2, conformado por PEDOT/copolímero.

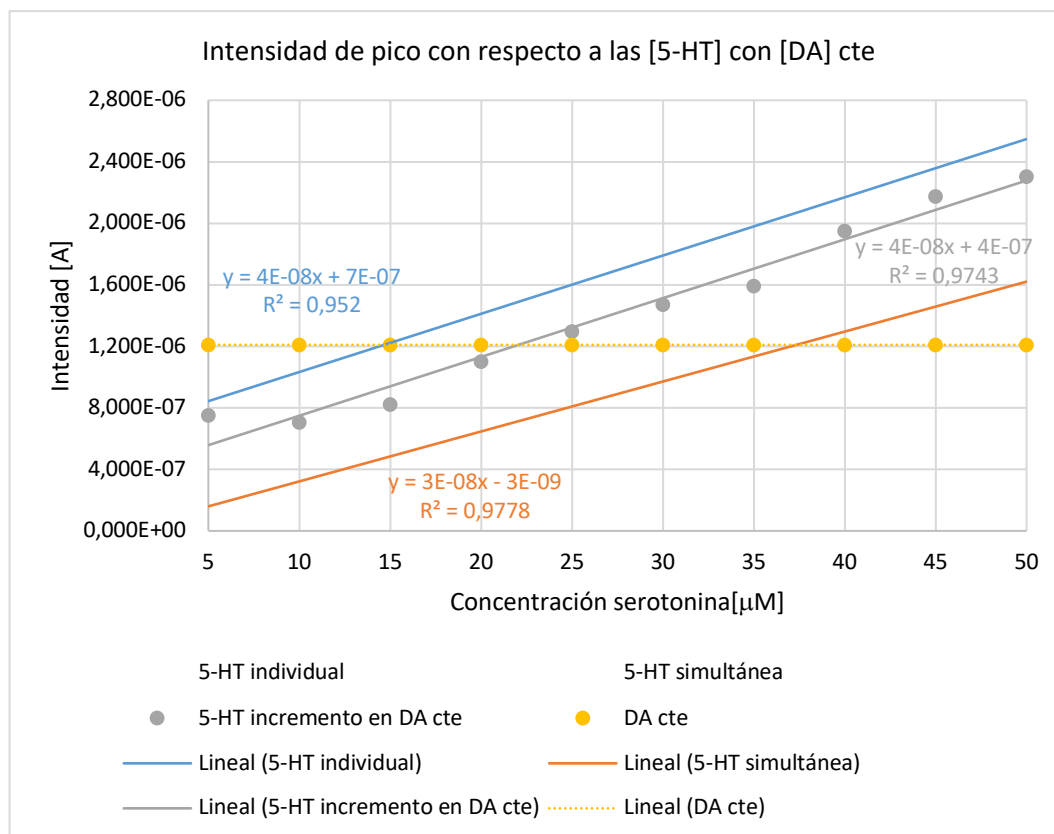


Figura 61: Comparación de las intensidades de pico con respecto a las concentraciones del sensor 2 conformado por PEDOT-Copolímero en el rango de detección. [Fuente: propia].

En la figura 63, los puntos y el modelo de regresión de la serotonina de esta última detección (gris) sigue la trayectoria de manera paralela la detección de la serotonina individualmente (azul) y la simultánea (naranja), es decir, los tres modelos tienen una pendiente similar. Pero esta última detección tiene el coeficiente de correlación mayor a la detección individual, con un valor de 0,9743.

En cuanto a la detección en esta última, se observa que la dopamina se mantiene constante en el pico de detección correspondiente (amarillo).

8. Análisis del impacto ambiental

En este trabajo no se ha realizado un estudio de impacto ambiental por estar fuera de los objetivos planteados al inicio, pero se especifica a continuación el protocolo seguido en la deposición de los reactivos utilizados, para evitar que tengan una repercusión negativa en el medioambiente.

Durante el proyecto se manipulan y utilizan diferentes sustancias químicas, se debe realizar según la tabla 10, para evitar problemas y reducir el impacto ambiental.

Tabla 9: Resumen de la eliminación correcta de las sustancias del proyecto

Sustancia residual	Vertimiento
Electrolito 3,4-etilendioxitiofeno	Bidón de "Disolventes halogenados"
Perclorato de litio	Bidón de "Disolventes halogenados"
Electrolito N-metilpyrrol	Bidón de "Disolventes halogenados"
Cloruro de sodio	Fregadero / desagüe
Acetona (son cantidades muy pequeñas)	Fregadero / desagüe
Etanol (son cantidades muy pequeñas)	Fregadero / desagüe
PBS	Fregadero / desagüe
Disolución de dopamina	Bidón de "Disolventes halogenados"
Disolución de serotonina	Bidón de "Disolventes halogenados"

Además, se debe cerciorar la disposición de los elementos utilizados como guantes, pipetas Pasteur, puntas de pipetas, entre otros, en el bidón identificado como "plástico contaminado". Éstos se tratan de elementos plásticos contaminados de restos de las sustancias mencionadas.

Conclusiones

Esta memoria comenzaba planteándose una serie de objetivos para la elaboración de este proyecto, una vez acabadas las partes teóricas y experimentales, procesado los datos y analizado los resultados, se presentan las conclusiones del estudio realizado a continuación:

- Se prepararon sistemas multicapa de los diferentes polímeros conductores PEDOT, PNMPy y copolímero PEDOT-PNMPy, mediante cronoamperometrías realizadas en una celda electrolítica y se prepararon de interfase nanoperforadas sobre lámina de acero AISI y sobre electrodo de carbono vítreo.
- Las configuraciones ensayadas sobre lámina de acero fueron:
 - PEDOT / COP / NaCl / COP / PEDOT.
 - PEDOT / COP / poro / COP / PEDOT.
- Las configuraciones ensayadas como sensor sobre electrodo de carbono vítreo fueron:
 - PEDOT (1s) / PNMPy (3s) / poro / PNMPy (3s) / PEDOT (3s).
 - PEDOT (1s) / PNMPy (3s) / poro / PNMPy (3s) / PEDOT (3s).
 - PEDOT (1s) / COP (3s) / poro / COP (3s) / PEDOT (3s).
 - PEDOT (1s) / COP (3s) / poro / COP (3s) / PEDOT (4s).
- La pérdida de electroactividad (LEA) y de la capacitancia específica (SC) de las diferentes multicapas se evaluó de manera efectiva mediante el valor obtenido de carga acumulada en ensayos de ciclovoltamperometría.
- Se observa que al aumentar el número de ciclos aplicados el LEA tiende a disminuir en todos los casos.
- Para los sistemas multicapa que contienen copolímero, se aprecia una disminución del LEA cuando se introduce una interface nanoperforada, debido probablemente a que la discontinuidad física actúa en detrimento de la estabilidad del electrodo.
- Con respecto a la capacitancia específica (SC) se observa que disminuye en todos los films generados a medida que aumenta el número de ciclos aplicados, pero en los nanoperforados es directamente proporcional a la carga final de generación del copolímero estudiado.
- Mediante cronopotenciometría se detectaron anomalías en los films no perceptibles a simple vista, ya que presentaron discontinuidades en la curva E vs t. Esta característica es importante en el caso de las multicapas con copolímero, puesto que sus propiedades mecánicas son pobres y tiene tendencia a agrietarse.
- Se ha observado que sólo son viables capas de copolímero con cargas de generación iguales o inferiores a 550 mC.
- Se prepararon tres tipos diferentes de sensor y se detectaron los compuestos dopamina y serotonina.

- Respecto a la **detección de dopamina**, los dos sensores ensayados funcionaron correctamente en el estudio de concentraciones comprendidas entre 0 y 100 μM , confirmando la validez de ambos sensores para la detección de dopamina.

Asimismo, se alcanzaron los límites de concentraciones mínimas de medición de 1 μM de dopamina para ambos sensores.

Se obtuvo para la dopamina una relación lineal entre la intensidad de pico y la concentración, con un coeficiente de correlación aceptable. Además, ambos sensores presentaron valores bajos de LEA, que oscilan entre el 0,2 y el 10%.

- Respecto a la **detección de la serotonina**, se observó una limitación en la detección de serotonina a concentraciones superiores a 40 μM para el sensor PEDOT-PNMPy y a 45 μM para el sensor PEDOT-COP. Se ensayó una nueva configuración del sensor con el fin de mejorar el límite de cuantificación y se consiguieron valores alrededor de 50 μM . También se ha constatado la influencia negativa de la presencia de nanoperforaciones en la multicapa para los sensores, ya que se aprecia que no comportan un aumento en la cantidad de sustancia detectada.

Asimismo, se alcanzaron los límites de concentraciones mínimas de medición de 1 μM de dopamina para ambos sensores.

Se delimitó el rango de estudio de la serotonina y se obtuvo una relación lineal entre la intensidad de pico y la concentración con un coeficiente de correlación aceptable.

- Respecto a la **detección simultánea de los neurotransmisores**, se confirma la validez de los sensores para todas las situaciones de este tipo de detección, en todos se obtiene una dependencia lineal de la intensidad de pico con respecto a la concentración de ambos neurotransmisores.
- Además, se ha confirmado reproducibilidad de los resultados obtenidos, lo cual hace aptos a este tipo de sensores para aplicaciones como biosensores.
- A la vista de los puntos mencionados, se puede interpretar que es viable la detección, tanto cualitativa como cuantitativa, de los neurotransmisores estudiados con la utilización de los polímeros conductores investigados y en los rangos de concentración especificados en el estudio.

Análisis Económico

Se realiza una aproximación del coste económico que conlleva el desarrollo de este proyecto, según el método experimental explicado. Se desarrolla de manera desglosada y se contabilizan los diferentes costes: personal, instrumental, material y de los reactivos.

Con respecto al coste personal de la ejecución del proyecto durante tres meses y medio, se detalla el siguiente:

Tabla 10: Coste de la mano de obra.

	Precio [€/h]	Cantidad de horas	Total [€]
Técnico de laboratorio	9	350	3150

En cuanto a los reactivos utilizados, los costes asociados a ellos (incluido IVA 21%) [34,35] se muestran a continuación:

Tabla 11: Costes de los reactivos.

	Precio	Cantidad	Total por reactivo [€]
Acetona	12,85 €/L	0,1 L	1,29
Acetonitrilo	137,91 €/L	0,5 L	68,96
Cloruro de potasio	0,09 €/g	2,0 g	0,18
Cloruro de sodio	0,04 €/g	25,0 g	1,00
Dihidrógeno fosfato de potasio	0,07 €/g	0,5 g	0,04
Dopamina	3,76 €/g	0,1 g	0,38
3,4-etilendioxitiofeno	7,23 €/g	0,5 g	3,62
Etanol	18,98 €/L	0,1 L	1,90
Fosfato disódico	0,75 €/g	0,2 g	0,15
N-metilpirrol	0,39 €/g	0,5 g	0,19
Perclorato de litio	4,54 €/g	0,2 g	0,91
Serotonina	2,41 €/g	0,1 g	0,24
Total [€]			78,82

Respecto a los costes de los materiales e instrumentos [35] utilizados durante la parte experimental del laboratorio, se realiza una amortización según los años de vida de los diferentes elementos y los meses de duración (3,5 meses) de la ejecución del proyecto, se enseñan en las siguientes tablas (12 y 13):

Tabla 12: Costes de los materiales.

	Precio [€/unidad]	Unidades	Años de vida	Total [€]
Celda abierta	180,00	2	5	10,62
Cinta Kapton	4,00	1	2	0,73
Contraelectrodos/electrodo de trabajo acero	2,00	4	2	0,88
Electrodo de referencia Ag/AgCl	121,00	2	2	17,94
Electrodo de trabajo carbono vítreo	154,00	2	1	45,50
Embudo alemán	3,63	1	5	0,27
Espátula	2,38	1	5	0,20
Matraz aforado de 10 mL	3,35	2	5	0,31
Matraz aforado de 100 mL	5,57	1	5	0,38
Matraz aforado de 50 mL	4,70	5	5	0,57
Micropipeta de 0,5 – 10 µL	62,92	1	5	3,73
Micropipeta de 10 – 100 µL	62,92	1	5	3,73
Pesas sustancias	3,87	1	5	0,28
Pipeta Pasteur	0,05	10	-	10,05
Probeta de 50 mL	3,00	1	5	0,23
			Total [€]	95,41

Tabla 13: Coste instrumentos electrónicos del laboratorio.

	Precio [€]	Años de vida.	Total cada elemento [€]
Balanza analítica	375	10	10,9
Baño de ultrasonido	150	10	4,4
Ordenador	650	6	31,6
Potenciostato	4500	12	109,4
Software NOVA 2.1.	2000	10	58,3
Total [€]			214,62

Por último, se suman los diferentes costes y se añade un 20% de imprevistos y servicios. El coste total aproximado del proyecto es:

Tabla 14: Resumen de los diferentes costes del proyecto.

	Precio [€]
Coste de los reactivos	81,01
Coste de los materiales	95,41
Coste de los instrumentos	214,62
Coste del personal	3150,00
Sub-total [€]	3541,04
Imprevistos y servicios (20%)	708,21
Total [€]	4249,25

Bibliografía

- [1] Merino, G., Méndez-Roja, M. y Beltrán, H. *Polímeros conductores: Nuevos materiales para el nuevo milenio*. 2018.
- [2] Iribarren, J., Liesa, F., Armelin, E., Casanovas, J. y Alemán, C. *Polímeros conductores con aplicaciones biomédicas y biotecnológicas*. 2004.
- [3] Alemán Llanso, Carlos. *Innovación de Materiales*. <https://eq.upc.edu/es/investigacion/imem> [en línea] [Consulta: 2 diciembre 2019].
- [4] FUTUR. Portal de la Producción Científica de los Investigadores de la UPC. <https://futur.upc.edu/IMEM-BRT>. [en línea] [Consulta: 2 diciembre 2019]
- [5] Fabregat, Georgina, et al. *Selective Detection of Dopamine Combining Multilayers of Conducting Polymers with Gold Nanoparticles*. 2014.
- [6] Vendrell, Marc. *Desenvolupament i assaig de nous materials polimèrics conductors en format multicapa: aplicació a la fabricació d'un sensor per a la detecció simultània de dopamina i serotonina*. Trabajo de fin de grado. Enero 2019.
- [7] Castro, Jeanfran. *Preparación y caracterización de films de polímero conductor (PEDOT y PNMPy) con interfase nanoperforada*. Informe de prácticas. Septiembre 2019.
- [8] Oliver, R., Muñoz, A., Ocampo, C., Alemán, C., Estrany, F. y Armelin, E. Ed. *Electrochemical characteristics of copolymers electrochemically synthesized from N-methylpyrrole and 3,4-ethylenedioxythiophene on steel electrodes: Comparison with homopolymers*. 2006.
- [9] Borràs, N., Alemán, C. y Estrany, F. *Interface Porosity in Multilayered All-Conducting Polymer Electrodes*. 2019.
- [10] Beltrán Rico, M. y Marcilla Gomis, A. *Tecnología de los polímeros: Procesados y propiedades*. Publicaciones Universidad de Alicante. 2012.
- [11] Areizaga J., Cartáza M., Elorza, J. y Iruin, J. ed. *Síntesis. Polímeros*. 2002.
- [12] Fernández. *Polímeros conductores*. Revista Iberoamericana de Polímeros Volumen VI. Diciembre de 2003.
- [13] Gómez, C., González, R., y Viruela, R. *Conductividad de las disoluciones electrolíticas*. 2009.

- [14] Arias Pardilla, Joaquin. *Síntesis y caracterización de polímeros conductores basados en anilinas sustituidas y su aplicación electrocatálisis*. 2007.
- [15] Teen-Hang Meen, Kan-Lin Chen, Yu-Hao Chen, Wen-Ray Chen, Dei-Wei Chou, Wen-How Lan y Chien-Jung Huang. The Effects of Dilute Sulfuric Acid on Sheet Resistance and Transmittance in Poly(3,4-thylenedioxythiophene): Poly(styrenesulfonate) Films. Ed. Hindawi. 2013.
- [16] F. Jonas, L. ". Groenendaal, D. Freitag, H. Pielartzik y J. R. Reynold. *Poly(3,4-ethylenedioxythiophene) and Its Derivatives: Past, Present, and Future*. Advanced Materials, vol. 12, núm. 7, pp. 481-494, 2000.
- [17] Sigma-Aldrich. *N-Methylpyrrole* 99%. (n.d.). <https://www.sigmaaldrich.com/catalog/product/aldrich/m78801?lang=es®ion=ES> [en línea] [Consultado: 29 diciembre 2020].
- [18] D.J. Shirale, V.K. Gade, P.D. Gaikwad, H.J. Kharat, K.P. Kakde, P.A. Savale, S.S. Hussaini, N.R. Dhumane, M.D. Shirsat. Ed. Elisaver. *The influence of electrochemical process parameters on the conductivity of poly(N-methylpyrrole) films by galvanostatic method*. 2005.
- [19] *Tipos de neurotransmisores: funciones y clasificación*. (n.d.). <https://psicologiyamente.com/neurociencias/tipos-neurotransmisores-funciones> [en línea] [Consultado: 3 Enero 2020].
- [20] Blog CogniFit. *¿Qué es la dopamina y para qué sirve? Preguntas y respuestas*. (n.d.). <https://blog.cognifit.com/es/que-es-la-dopamina-y-para-que-sirve/>. [en línea] [Consultado: 3 Enero 2020].
- [21] Sánchez-López, A., Centurión, D., Lozano-Cuenca, J., Muñoz-Islas, E., Cobos-Puc, L. E., & Villalón, C. M. *Receptores de la serotonina que inhiben el tono simpático vasopresor en la rata descerebrada y desmodulada*. 2009.
- [22] Serotonina. *¿Qué es?, propiedades, alimentos, beneficios*. (n.d.). <https://mundoasistencial.com/serotonina/>. [en línea] [Consultado: 3 Enero 2020].
- [23] Harvey, David. *Modern Analytical Chemistry*. Editorial: McGraw-Hill Companies: 2000. p 667]
- [24] Atkins y de Paula. *Atkins física y química*. 8ª Edición. Editorial Médica Panamericana. pp. 276.
- [25] Baeza Reyes, A. y García Mendoza, A. UNAM. *Principios de la electroquímica analítica*. 2011.
- [26] D. Browson y C. Banks. ed.t. *The Handboock of Graphene Electrochemistry*. 2014.

- [27] *Acetona (Química)*. (n.d.). <https://glosarios.servidor-alicante.com/quimica/acetona>. [en línea] [Consultado: 4 Enero 2020].
- [28] Mricc.com. *Solución de acetonitrilo*.(n.d.). <https://es.mricc.com/acetonitrile-solution.html>. [en línea] [Consultado: 3 Enero 2020].
- [29] *Clasificación de la Materia » TP - Laboratorio Químico*. (n.d.). <https://www.tplaboratorioquimico.com/quimica-general/las-propiedades-de-la-materia/clasificacion-de-la-materia.html>. [en línea] [Consultado: 3 Enero 2020].
- [30] *Fosfato de potasio monobásico (MKP, KH₂PO₄)* (n.d.). <https://www.amazon.es/Fosfato-potasio-monobásico-MKP-KH2PO4/dp/B013NG1TSO>. [en línea] [Consultado: 3 Enero 2020].
- [31] Sigma-Aldrich. *3,4-Ethylenedioxythiophene* 97% (n.d.). <https://www.sigmaaldrich.com/catalog/product/aldrich/483028?lang=es®ion=ES>. [en línea] [Consultado: 3 Enero 2020].
- [32] *Fórmula Esquelética Del Etanol Stock de ilustración* (n.d.). <https://es.dreamstime.com/fórmula-esquelética-del-etanol-image129790973>. [en línea] [Consultado: 3 Enero 2020].
- [33] *1-Metilpirrol*. (n.d.). https://www.merckmillipore.com/ES/es/product/1-Methylpyrrole,MDA_CHEM-820832?ReferrerURL=https%3A%2F%2Fwww.google.com%2F. [en línea] [Consultado: 3 Enero 2020].
- [34] Sigma-Aldrich. Spain (n.d.). <https://www.sigmaaldrich.com/chemistry/chemical-synthesis/chemical-synthesis-catalog.html>. [en línea] [Consultado: 12 Enero 2020].
- [35] Catalogo 1: Material general de laboratorio y reactivos. IBDCiencia. 2019.
- [36] ICSC 0087 - ACETONA. (n.d.). http://www.ilo.org/dyn/icsc/showcard.display?p_card_id=87&p_edit=&p_version=2&p_lang=es [en línea] [Consultado: 13 Enero 2020].
- [37] ICSC 0088 - ACETONITRILO. (n.d.). http://www.ilo.org/dyn/icsc/showcard.display?p_card_id=88&p_edit=&p_version=2&p_lang=es. [en línea] [Consultado: 13 Enero 2020].
- [38] ICSC 1450 - CLORURO DE POTASIO. (n.d.). http://www.ilo.org/dyn/icsc/showcard.display?p_card_id=1450&p_edit=&p_version=2&p_lang=es. [en línea] [Consultado: 13 Enero 2020].

- [39] SODIO CLORURO.FDS (n.d.).
http://www.foresosona.org/productes_quimics/protocols/Sodiocloruro.pdf [en línea] [Consultado: 13 Enero 2020].
- [40] ICSC 1608 - DIHIDROGENOFOSFATO DE POTASIO. (n.d.).
http://www.ilo.org/dyn/icsc/showcard.display?p_card_id=1608&p_edit=&p_version=2&p_lang=es
 [Consultado: 13 Enero 2020].
- [41] MSDS - 483028. (n.d.).
<https://www.sigmaaldrich.com/MSDS/MSDS/DisplayMSDSPage.do?country=ES&language=es&productNumber=483028&brand=ALDRICH&PageToGoToURL=https%3A%2F%2Fwww.sigmaaldrich.com%2Fcatalog%2Fproduct%2Faldrich%2F483028%3Flang%3Des>. [en línea] [Consultado: 13 Enero 2020].
- [42] ICSC 0044 - ETANOL (ANHIDRO). (n.d.).
http://www.ilo.org/dyn/icsc/showcard.display?p_card_id=44&p_edit=&p_version=2&p_lang=es [en línea] [Consultado: 13 Enero 2020].
- [43] ICSC 1129 - HIDROGENOFOSFATO DE DISODIO. (n.d.).
http://www.ilo.org/dyn/icsc/showcard.display?p_card_id=1129&p_edit=&p_version=2&p_lang=es
 [en línea] [Consultado: 13 Enero 2020].
- [44] ICSC 1198 - NITRÓGENO (gas comprimido). (n.d.).
http://www.ilo.org/dyn/icsc/showcard.display?p_card_id=1198&p_edit=&p_version=2&p_lang=es
 [en línea] [Consultado: 13 Enero 2020].
- [45] 1-Metilpirrol MSDS - 820832 - Merck. (n.d.).
https://www.merckmillipore.com/ES/es/product/msds/MDA_CHEM-820832?Origin=PDP [en línea] [Consultado: 13 Enero 2020].
- [46] MSDS - 431567. (n.d.).
<https://www.sigmaaldrich.com/MSDS/MSDS/DisplayMSDSPage.do?country=ES&language=es&productNumber=431567&brand=ALDRICH> [en línea] [Consultado: 13 Enero 2020].


Anexo A. Fichas de seguridad.

A.1. Acetona [36].

ACETONA 2-Propanona Dimetil cetona Metil cetona	ICSC: 0087 Abril 2009
CAS: 67-64-1 Nº ONU: 1090 CE: 200-662-2	

	PELIGROS	PREVENCIÓN	LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO Y EXPLOSIÓN	Altamente inflamable. Las mezclas vapor/aire son explosivas. El calentamiento intenso puede producir aumento de la presión con riesgo de estallido.	Evitar las llamas, NO producir chispas y NO fumar. Sistema cerrado, ventilación, equipo eléctrico y de alumbrado a prueba de explosión. NO utilizar aire comprimido para llenar, vaciar o manipular. Utilícense herramientas manuales no generadoras de chispas.	Usar polvo, espuma resistente al alcohol, agua, dióxido de carbono. En caso de incendio: mantener fríos los bidones y demás instalaciones rociando con agua.

	SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS
Inhalación	Dolor de garganta. Tos. Confusión mental. Dolor de cabeza. Vértigo. Somnolencia. Pérdida del conocimiento.	Usar ventilación, extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo. Proporcionar asistencia médica.
Piel	Piel seca.	Guantes de protección.	Quitar las ropas contaminadas. Aclarar la piel con agua abundante o ducharse.
Ojos	Enrojecimiento. Dolor. Visión borrosa.	Utilizar gafas de protección.	Enjuagar con agua abundante (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad). Proporcionar asistencia médica.
Ingestión	Náuseas. Vómitos. Además ver Inhalación.	No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo. Lavarse las manos antes de comer.	Enjuagar la boca. Proporcionar asistencia médica.

DERRAMES Y FUGAS	CLASIFICACIÓN Y ETIQUETADO
Eliminar toda fuente de ignición. Protección personal: respirador con filtro para gases y vapores orgánicos de bajo punto de ebullición adaptado a la concentración de la sustancia en el aire. Ventilar. Recoger el líquido procedente de la fuga en recipientes precintables. Absorber el líquido residual en arena o absorbente inerte. A continuación, almacenar y eliminar el residuo conforme a la normativa local. NO verterlo en el alcantarillado.	<p>Conforme a los criterios del GHS de la ONU</p> <div style="text-align: center;">  PELIGRO </div> <p>Líquido y vapores muy inflamables Provoca irritación ocular</p> <p>Transporte Clasificación ONU Clase de Peligro ONU: 3; Grupo de Embalaje/Envase ONU: II</p>
ALMACENAMIENTO	
A prueba de incendio. Separado de: ver Peligros Químicos. Almacenar en un área sin acceso a desagües o alcantarillas.	
ENVASADO	

La información original ha sido preparada en inglés por un grupo internacional de expertos en nombre de la OIT y la OMS, con la asistencia financiera de la Comisión Europea.
© OIT y OMS 2018






ACETONA		ICSC: 0087
INFORMACIÓN FÍSICO-QUÍMICA		
Estado físico; aspecto LÍQUIDO INCOLORO DE OLOR CARACTERÍSTICO.		Fórmula: C_3H_6O / $CH_3-CO-CH_3$ Masa molecular: 58.1 Punto de ebullición: 56°C Punto de fusión: -95°C Densidad relativa (agua = 1): 0.8 Solubilidad en agua: miscible Presión de vapor, kPa a 20°C: 24 Densidad relativa de vapor (aire = 1): 2.0 Densidad relativa de la mezcla vapor/aire a 20°C (aire = 1): 1.2 Punto de inflamación: -18°C c.c. Temperatura de autoignición: 465°C Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 2.2-13 Coeficiente de reparto octanol/agua como log Pow: -0.24 Viscosidad: 0.34 mm²/s a 40°C
Peligros físicos El vapor es más denso que el aire y puede extenderse a ras del suelo; posible ignición en punto distante.		
Peligros químicos El contacto con oxidantes fuertes tales como ácido acético, ácido nítrico y peróxido de hidrógeno genera peróxidos explosivos. Reacciona con cloroformo y bromoformo en condiciones básicas. Esto genera peligro de incendio y explosión. Ataca los plásticos.		
EXPOSICIÓN Y EFECTOS SOBRE LA SALUD		
Vías de exposición La sustancia se puede absorber por inhalación.		Riesgo de inhalación Por evaporación de esta sustancia a 20°C se puede alcanzar bastante rápidamente una concentración nociva en el aire, más rápidamente por pulverización o cuando se dispersa.
Efectos de exposición de corta duración La sustancia irrita los ojos y el tracto respiratorio. La exposición a concentraciones altas podría causar disminución del estado de alerta.		Efectos de exposición prolongada o repetida La sustancia desengrasa la piel, lo que puede producir sequedad y agrietamiento. El contacto prolongado o repetido con la piel puede producir sequedad y agrietamiento.
LÍMITES DE EXPOSICIÓN LABORAL		
TLV: 250 ppm como TWA; 500 ppm como STEL; BEI establecido; A4 (no clasificado como cancerígeno humano). MAK: 1200 mg/m³, 500 ppm; categoría de limitación de pico: I(2); riesgo para el embarazo: grupo B. EU-OEL: 1210 mg/m³, 500 ppm como TWA		
MEDIO AMBIENTE		
NOTAS		
El consumo de bebidas alcohólicas aumenta el efecto nocivo.		
INFORMACIÓN ADICIONAL		
- Límites de Exposición Profesional (INSHT 2011): VLA-ED: 500 ppm; 1210 mg/m³ VLB: 50 mg/l (en orina). Nota I: El determinante es inespecífico puesto que puede encontrarse después de la exposición a otros agentes químicos. - N° de índice (clasificación y etiquetado armonizados conforme al Reglamento CLP de la UE): 606-001-00-8 - Clasificación UE Pictograma: F, Xi, R: 11-36-66-67; S: (2)-9-16-26		
 GOBIERNO DE ESPAÑA MINISTERIO DE TRABAJO, MIGRACIONES Y SEGURIDAD SOCIAL		La calidad y exactitud de la traducción o el posible uso que se haga de esta información no es responsabilidad de la OIT, la OMS ni la Comisión Europea. © Versión en español, INSST, 2018
 insst Instituto Nacional de Seguridad y Salud en el Trabajo		

A.2. Acetonitrilo [37]

ACETONITRILLO Cianuro de metilo Cianometano Etanonitrilo Metanocarbonitrilo	ICSC: 0088 Junio 2011
CAS: 75-05-8 Nº ONU: 1648 CE: 200-835-2	

	PELIGROS	PREVENCIÓN	LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO Y EXPLOSIÓN	Altamente inflamable. En caso de incendio se desprenden humos (o gases) tóxicos e irritantes. Las mezclas vapor/aire son explosivas. Riesgo de incendio y explosión en contacto con oxidantes fuertes. El calentamiento intenso puede producir aumento de la presión con riesgo de estallido.	Evitar las llamas, NO producir chispas y NO fumar. NO poner en contacto con superficies calientes u oxidantes fuertes. Sistema cerrado, ventilación, equipo eléctrico y de alumbrado a prueba de explosión. NO utilizar aire comprimido para llenar, vaciar o manipular. Utilícense herramientas manuales no generadoras de chispas.	Usar polvo, espuma, dióxido de carbono. El agua puede ser ineficaz. En caso de incendio: mantener fríos los bidones y demás instalaciones rociando con agua.

¡EVITAR LA FORMACIÓN DE NIEBLAS DEL PRODUCTO! ¡HIGIENE ESTRICTA! ¡CONSULTAR AL MÉDICO EN TODOS LOS CASOS!			
	SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS
Inhalación	Dolor de garganta. Debilidad. Opresión en el pecho. Jadeo. Vértigo. Náuseas. Vómitos. Convulsiones. Pérdida del conocimiento. Síntomas no inmediatos.	Usar ventilación, extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo. Puede ser necesaria respiración artificial. No aplicar respiración boca a boca. Proporcionar asistencia médica inmediatamente. Ver Notas.
Piel	¡FÁCIL ABSORCIÓN!	Guantes de protección. Traje de protección.	Quitar las ropas contaminadas. Aclarar la piel con agua abundante o ducharse. Proporcionar asistencia médica.
Ojos	Enrojecimiento. Dolor.	Utilizar pantalla facial o protección ocular en combinación con protección respiratoria.	Enjuagar con agua abundante (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad). Proporcionar asistencia médica inmediatamente.
Ingestión	Ver Inhalación.	No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo. Lavarse las manos antes de comer.	Enjuagar la boca. Dar a beber uno o dos vasos de agua. NO provocar el vómito. Proporcionar asistencia médica inmediatamente.

DERRAMES Y FUGAS	CLASIFICACIÓN Y ETIQUETADO
¡Consultar a un experto! Protección personal: traje de protección completo incluyendo equipo autónomo de respiración. Ventilar. Eliminar toda fuente de ignición. Recoger, en la medida de lo posible, el líquido que se derrama y el ya derramado en recipientes precintables. Absorber el líquido residual en arena seca o absorbente inerte. A continuación, almacenar y eliminar el residuo conforme a la normativa local.	Conforme a los criterios del GHS de la ONU
ALMACENAMIENTO	   <p>PELIGRO</p> <p>Líquido y vapores muy inflamables Tóxico en contacto con la piel o si se inhala Nocivo en caso de ingestión Provoca irritación ocular grave Puede ser nocivo en caso de ingestión y de penetración en las vías respiratorias Puede provocar daños en la sangre tras exposiciones prolongadas o repetidas</p>
ENVASADO	<p>Transporte Clasificación ONU Clase de Peligro ONU: 3; Grupo de Embalaje/Envase ONU: II</p>

ACETONITRILO		ICSC: 0088
INFORMACIÓN FÍSICO-QUÍMICA		
Estado físico; aspecto LÍQUIDO INCOLORO DE OLOR CARACTERÍSTICO.		Fórmula: C_2H_3N / CH_3CN Masa molecular: 41.0 Punto de ebullición: 82°C Punto de fusión: -46°C Densidad relativa (agua = 1): 0.8 Solubilidad en agua, g/100ml a 20°C: 1390 (muy elevada) Presión de vapor, kPa a 25°C: 9.9 Densidad relativa de vapor (aire = 1): 1.4 Densidad relativa de la mezcla vapor/aire a 20°C (aire = 1): 1.04 Punto de inflamación: 2°C c.c. Temperatura de autoignición: 524°C Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 3.0-17 Coeficiente de reparto octanol/agua como log Pow: -0.3 Viscosidad: 0.35 cP a 20°C
Peligros físicos El vapor se mezcla bien con el aire, formándose fácilmente mezclas explosivas.		
Peligros químicos Se descompone por calentamiento intenso o al arder y en contacto con superficies calientes. Esto produce humos tóxicos incluyendo cianuro de hidrógeno y óxidos de nitrógeno. Reacciona violentamente con oxidantes fuertes. Esto genera peligro de incendio y explosión. Reacciona con ácidos y bases. Esto produce cianuro de hidrógeno tóxico e inflamable. Ataca algunas formas de plásticos, el caucho y revestimientos.		
EXPOSICIÓN Y EFECTOS SOBRE LA SALUD		
Vías de exposición La sustancia se puede absorber por inhalación del vapor, a través de la piel y por ingestión.		Riesgo de inhalación Por evaporación de esta sustancia a 20°C se puede alcanzar bastante rápidamente una concentración nociva en el aire.
Efectos de exposición de corta duración La sustancia irrita los ojos. La sustancia puede afectar a la respiración celular (inhibición). Esto puede dar lugar a convulsiones y fallo respiratorio. La exposición muy por encima del LEP podría causar la muerte. Los efectos pueden aparecer de forma no inmediata. Se recomienda vigilancia médica.		Efectos de exposición prolongada o repetida La sustancia puede afectar a la sangre. Esto puede dar lugar a anemia. La sustancia puede afectar a los riñones, al hígado y a la tiroides. Esto puede dar lugar a alteraciones funcionales.
LÍMITES DE EXPOSICIÓN LABORAL		
TLV: 20 ppm como TWA; (piel); A4 (no clasificado como cancerígeno humano). MAK: 17 mg/m ³ , 10 ppm; categoría de limitación de pico: II(2); absorción dérmica (H); riesgo para el embarazo: grupo C. EU-OEL: 70 mg/m ³ , 40 ppm como TWA; (piel)		
MEDIO AMBIENTE		
Los efectos de esta sustancia sobre el medio ambiente han sido investigados adecuadamente, pero no se ha encontrado ninguno significativo.		
NOTAS		
En caso de envenenamiento con esta sustancia es necesario realizar un tratamiento específico; así como disponer de los medios adecuados junto a las instrucciones correspondientes. El oxígeno debe ser administrado exclusivamente por personal sanitario o de primeros auxilios especialmente formados. NO llevar a casa la ropa de trabajo.		
INFORMACIÓN ADICIONAL		
- Límites de exposición profesional (INSHT 2012): VLA-ED: 40 ppm; 68 mg/m ³ Notas: vía dérmica. - N° de índice (clasificación y etiquetado armonizados conforme al Reglamento CLP de la UE): 608-001-00-3 - Clasificación UE Pictograma: F, Xn; R: 11-20/21/22-36; S: (2)-16-36/37		

A.3. Cloruro de potasio [38].

CLORURO DE POTASIO	ICSC: 1450 Junio 2003
CAS: 7447-40-7	
CE: 231-211-8	

	PELIGROS	PREVENCIÓN	LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO Y EXPLOSIÓN	No combustible.		En caso de incendio en el entorno: usar un medio de extinción adecuado.

	SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS
Inhalación	Tos. Dolor de garganta.	Usar extracción localizada.	Aire limpio, reposo.
Piel		Guantes de protección.	Aclarar la piel con agua abundante o ducharse.
Ojos	Enrojecimiento. Dolor.	Utilizar gafas de protección de montura integral.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad), después proporcionar asistencia médica.
Ingestión	Diarrea. Náuseas. Vómitos. Debilidad. Convulsiones.	No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo.	Enjuagar la boca. Provocar el vómito (¡ÚNICAMENTE EN PERSONAS CONSCIENTES!). Dar a beber uno o dos vasos de agua. Proporcionar asistencia médica.

DERRAMES Y FUGAS	CLASIFICACIÓN Y ETIQUETADO
Barrer la sustancia derramada e introducirla en un recipiente tapado. Recoger cuidadosamente el residuo. A continuación, almacenar y eliminar el residuo conforme a la normativa local. Protección personal: respirador con filtro para partículas adaptado a la concentración de la sustancia en aire.	Conforme a los criterios del GHS de la ONU
ALMACENAMIENTO	Transporte Clasificación ONU
Seco.	
ENVASADO	



Organización
Internacional
del Trabajo



Organización
Mundial de la Salud

La información original ha sido preparada en inglés por un grupo internacional de expertos en nombre de la OIT y la OMS, con la asistencia financiera de la Comisión Europea.
© OIT y OMS 2018



European
Commission



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

CLORURO DE POTASIO	ICSC: 1450
---------------------------	-------------------

INFORMACIÓN FÍSICO-QUÍMICA	
-----------------------------------	--

Estado físico; aspecto CRISTALES INCOLOROS HIGROSCÓPICOS.	Fórmula: KCl Masa molecular: 74.6 Punto de sublimación: 1500°C Punto de fusión: 770-773°C Densidad: 1.98 g/cm³ Solubilidad en agua a 20°C: elevada
---	---

EXPOSICIÓN Y EFECTOS SOBRE LA SALUD	
--	--

Vías de exposición La sustancia se puede absorber por ingestión.	Riesgo de inhalación La evaporación a 20°C es despreciable; sin embargo, se puede alcanzar rápidamente una concentración molesta de partículas en el aire cuando se dispersa, especialmente si está en forma de polvo.
--	--

LÍMITES DE EXPOSICIÓN LABORAL

MEDIO AMBIENTE

NOTAS

INFORMACIÓN ADICIONAL

Clasificación UE

 <p>GOBIERNO DE ESPAÑA</p>	<p>MINISTERIO DE TRABAJO, MIGRACIONES Y SEGURIDAD SOCIAL</p>	 <p>INSST Instituto Nacional de Seguridad y Salud en el Trabajo</p>	<p>La calidad y exactitud de la traducción o el posible uso que se haga de esta información no es responsabilidad de la OIT, la OMS ni la Comisión Europea.</p> <p>© Versión en español, INSST, 2018</p>
---	--	--	--

A.4. Cloruro de sodio [39].

Ficha de Datos de Seguridad

ACOFARMA

Conforme al Reglamento (CE) N° 1907/2006 (REACH)

1.- Identificación de la sustancia o del preparado y de la sociedad o empresa

Identificación de la sustancia o del preparado

Denominación: Sodio cloruro cristal Ph.Eur.

Identificación de la sociedad o empresa: Acofarma Distribución S.A.
Llobregat, 20
08223-Terrassa. España.
Tel: 93 736 00 88 / Fax: 93 785 93 62

Teléfono de urgencias: Instituto Nacional de Toxicología. Madrid. Tel: 91 562 04 20

2.- Identificación de los peligros

Clasificación de la sustancia o mezcla

De acuerdo al Reglamento (EC) No1272/2008

Irritación ocular (Categoría 2)

Esta sustancia no esta clasificada como peligrosa según la Directiva 67/548/CEE.

Elementos de la etiqueta



Pictograma

Palabra de advertencia Atención

Indicación(es) de peligro

H319 Provoca irritación ocular grave.

Declaración(es) de prudencia

P305 + P351 + P338 EN CASO DE CONTACTO CON LOS OJOS: Aclarar cuidadosamente con agua durante varios minutos. Quitar las lentes de contacto, si lleva y resulta fácil. Seguir aclarando.

Otros Peligros - ninguno(a)

3.- Composición/información sobre los componentes

CAS-N°.: 7647-14-5 EINECS.: 231-598-3

PM: 58.44

Fórmula molecular: ClNa

4.- Primeros auxilios

Tras contacto con los ojos: Aclarar con agua.

Tras ingestión (grandes cantidades): Consultar al médico si subsiste malestar.

5.- Medidas de lucha contra incendios

Medios de extinción adecuados:

Adaptar los materiales al entorno.

Riesgos especiales:

Ninguno/a.

Referencias adicionales:

Incombustible.

Ficha de Datos de Seguridad ACOFARMA

Denominación: Sodio cloruro cristal Ph.Eur.

6.- Medidas a tomar en caso de vertido accidental

Procedimientos de recogida/limpieza:

Recoger en seco y proceder a la eliminación de los residuos. Eliminar los residuos con mucho agua.

7.- Manipulación y almacenamiento

Manipulación:

Sin otras exigencias.

Almacenamiento:

Almacenar bien cerrado. Seco.

8.- Controles de exposición/protección personal

Protección personal:

Protección respiratoria: Innecesaria.

Protección de las manos: Precisa.

Protección de los ojos: Innecesaria.

Medidas de higiene particulares:

Lavarse las manos al finalizar el trabajo.

9.- Propiedades físicas y químicas

Estado físico: Sólido

Color: Blanco

Olor: Inodoro

Valor pH

(a 50g/l/H ₂ O) (20°C)	5-8
Punto de fusión	800 °C
Punto de ebullición	1461 °C
Punto de ignición	no disponible
Punto de destello	no disponible
Limites de explosión	bajo no disponible
	alto no disponible
Densidad (20°C)	2.16 g/cm ³
Densidad de amontonamiento	aprox. 1140 kg/m ³
Solubilidad en	
agua (20°C)	360 g/l

10.- Estabilidad y reactividad

Condiciones a evitar:

Información no disponible.

Materias a evitar:

Información no disponible.

Productos de descomposición peligrosos:

Información no disponible.

Ficha de Datos de Seguridad ACOFARMA

Denominación: Sodio cloruro cristal Ph.Eur.

11.- Información toxicológica

Toxicidad aguda:

DL₅₀ (oral, rata): 3000 mg/kg

Informaciones adicionales sobre toxicidad:

Tras contacto con los ojos: Irritaciones.

Tras ingestión de grandes cantidades: Náuseas, vómito.

Información complementaria:

No deben esperarse efectos tóxicos si la manipulación es adecuada.

12.- Informaciones ecológicas

Efectos ecotóxicos:

Sin observaciones especiales.

Otras observaciones ecológicas:

Manteniendo las condiciones adecuadas de manejo no deben esperarse problemas ecológicos.

13.- Consideraciones relativas a la eliminación

Producto:

En la Unión Europea no están regulados, por el momento, los criterios homogéneos para la eliminación de residuos químicos. Aquellos productos químicos, que resultan como residuos del uso cotidiano de los mismos, tienen en general, el carácter de residuos especiales. Su eliminación en los países comunitarios se encuentra regulada por leyes y disposiciones locales.

Le rogamos contacte con aquella entidad adecuada en cada caso (Administración Pública, o bien Empresa especializada en la eliminación de residuos), para informarse sobre su caso particular.

Envases:

Su eliminación debe realizarse de acuerdo con las disposiciones oficiales. Para los embalajes contaminados deben adoptarse las mismas medidas que para el producto contaminante. Los embalajes no contaminados se tratarán como residuos domésticos o como material reciclable.

14.- Información relativa al transporte

No sometido a las normas de transporte.

15.- Información Reglamentaria

La hoja técnica de seguridad cumple con los requisitos de la Reglamento (CE) No. 1907/2006.

16.- Otras informaciones

Texto de códigos H y frases R mencionadas en la sección 2

Fecha de emisión: 8-11-99

Fecha de edición 2ª: 14-12-10

Los datos suministrados en esta ficha de seguridad se basan en nuestro actual conocimiento. Describen tan sólo las medidas de seguridad en el manejo de este producto y no representan una garantía sobre las propiedades descritas del mismo.



A.5. Dihidrógenofosfato de potasio [40].

DIHIDROGENOFOSFATO DE POTASIO	ICSC: 1608
Fosfato monobásico de potasio Sal monopotásica del ácido fosfórico	Octubre 2005
CAS: 7778-77-0	
CE: 231-913-4	

	PELIGROS	PREVENCIÓN	LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO Y EXPLOSIÓN	No combustible. En caso de incendio se desprenden humos (o gases) tóxicos e irritantes.		En caso de incendio en el entorno: usar un medio de extinción adecuado.

	SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS
Inhalación	Tos.	Usar ventilación (no si es polvo), extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo.
Piel	Enrojecimiento.	Guantes de protección.	Aclarar la piel con agua abundante o ducharse.
Ojos	Enrojecimiento. Dolor.	Utilizar gafas de protección de montura integral.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad), después proporcionar asistencia médica.
Ingestión	Dolor abdominal. Vómitos. Diarrea. Náuseas.	No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo.	Enjuagar la boca. Dar a beber uno o dos vasos de agua.

DERRAMES Y FUGAS	CLASIFICACIÓN Y ETIQUETADO
Protección personal: respirador con filtro para partículas adaptado a la concentración de la sustancia en aire. Barrer la sustancia derramada e introducirla en un recipiente tapado.	Conforme a los criterios del GHS de la ONU
ALMACENAMIENTO	Transporte
Separado de bases fuertes.	Clasificación ONU
ENVASADO	



Organización
Internacional
del Trabajo



Organización
Mundial de la Salud

La información original ha sido preparada en inglés por un grupo internacional de expertos en nombre de la OIT y la OMS, con la asistencia financiera de la Comisión Europea.
© OIT y OMS 2018



European
Commission



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

DIHIDROGENOFOSFATO DE POTASIO		ICSC: 1608
INFORMACIÓN FÍSICO-QUÍMICA		
Estado físico; aspecto CRISTALES INCOLOROS O POLVO BLANCO CRISTALINO.		Fórmula: KH_2PO_4 Masa molecular: 136.1 Punto de fusión: 253°C Densidad: 2.34 g/cm³ Solubilidad en agua, g/100ml: 22
Peligros físicos		
Peligros químicos Se descompone por calentamiento. Esto produce gases tóxicos. La disolución en agua es un ácido débil.		
EXPOSICIÓN Y EFECTOS SOBRE LA SALUD		
Vías de exposición La sustancia se puede absorber por ingestión.		Riesgo de inhalación Puede alcanzarse rápidamente una concentración nociva de partículas suspendidas en el aire cuando se dispersa, especialmente si está en forma de polvo.
Efectos de exposición de corta duración La sustancia irrita los ojos, la piel y el tracto respiratorio.		Efectos de exposición prolongada o repetida
LÍMITES DE EXPOSICIÓN LABORAL		
MEDIO AMBIENTE		
NOTAS		
INFORMACIÓN ADICIONAL		
Clasificación UE		
<div>  <div> GOBIERNO DE ESPAÑA MINISTERIO DE TRABAJO, MIGRACIONES Y SEGURIDAD SOCIAL </div> </div> <div>  <div> insst Instituto Nacional de Seguridad y Salud en el Trabajo </div> </div> <div> La calidad y exactitud de la traducción o el posible uso que se haga de esta información no es responsabilidad de la OIT, la OMS ni la Comisión Europea. © Versión en español, INSST, 2018 </div>		

A.6. 3,4-etilendioxitiofeno [41]



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Versión 6.1
Fecha de revisión 05.10.2019
Fecha de impresión 15.01.2020

SECCIÓN 1. Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa

1.1 Identificadores del producto

Nombre del producto : 3,4-Ethylenedioxythiophene

Referencia : 483028

Marca : Aldrich

REACH No. : Un número de registro no está disponible para esta sustancia, ya que la sustancia o sus usos están exentos del registro, el tonelaje anual no requiere registro o dicho registro está previsto para una fecha posterior

No. CAS : 126213-50-1

1.2 Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados

Usos identificados : Reactivos para laboratorio, Fabricación de sustancias

1.3 Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad

Compañía : Merck Life Science S.L.
Calle Maria de Molina 40
E-28006 MADRID

Teléfono : +34 916 619 977

Fax : +34 916 619 642

E-mail de contacto : serviciotecnico@merckgroup.com

1.4 Teléfono de emergencia

Teléfono de Urgencia : 900-868538 (CHEMTREC España)
+(34)-931768545 (CHEMTREC internacional)

SECCIÓN 2. Identificación de los peligros

2.1 Clasificación de la sustancia o de la mezcla

Clasificación de acuerdo con el Reglamento (CE) 1272/2008

Toxicidad aguda, Oral (Categoría 4), H302

Toxicidad aguda, Cutáneo (Categoría 3), H311

Irritación ocular (Categoría 2), H319

Para el texto integro de las Declaraciones-H mencionadas en esta sección, véase la Sección 16.

2.2 Elementos de la etiqueta

Etiquetado de acuerdo con el Reglamento (CE) 1272/2008

Pictograma



Palabra de advertencia Peligro

Indicación(es) de peligro

H302 Nocivo en caso de ingestión.
H311 Tóxico en contacto con la piel.
H319 Provoca irritación ocular grave.

Declaración(es) de prudencia

P280 Llevar guantes/ prendas de protección.
P301 + P312 + P330 EN CASO DE INGESTIÓN: Llamar a un CENTRO DE TOXICOLOGÍA/médico si la persona se encuentra mal. Enjuagar la boca.
P302 + P352 + P312 EN CASO DE CONTACTO CON LA PIEL: Lavar con abundante agua. Llamar a un CENTRO DE TOXICOLOGÍA/médico si la persona se encuentra mal.
P305 + P351 + P338 EN CASO DE CONTACTO CON LOS OJOS: Enjuagar con agua cuidadosamente durante varios minutos. Quitar las lentes de contacto cuando estén presentes y pueda hacerse con facilidad. Proseguir con el lavado.

Declaración Suplementaria ninguno(a)
del Peligro

2.3 Otros Peligros

Esta sustancia/mezcla no contiene componentes que se consideren que sean bioacumulativos y tóxicos persistentes (PBT) o muy bioacumulativos y muy persistentes (vPvB) a niveles del 0,1% o superiores.

SECCIÓN 3. Composición/información sobre los componentes

3.1 Sustancias

Sinónimos : 2,3-Dihydrothieno[3,4-b]-1,4-dioxin
EDOT

Formula : C₆H₆O₂S
Peso molecular : 142,18 g/mol
No. CAS : 126213-50-1

Componente	Clasificación	Concentración
3,4-Ethylenedioxythiophene	Acute Tox. 4; Acute Tox. 3; Eye Irrit. 2; H302, H311, H319	<= 100 %

Para el texto integro de las Declaraciones-H mencionadas en esta sección, véase la Sección 16.

SECCIÓN 4. Primeros auxilios

4.1 Descripción de los primeros auxilios

Recomendaciones generales

Consultar a un médico. Mostrar esta ficha de seguridad al doctor que esté de servicio.

Si es inhalado

Si aspiró, mueva la persona al aire fresco. Si ha parado de respirar, hacer la respiración artificial. Consultar a un médico.

En caso de contacto con la piel

Eliminar lavando con jabón y mucha agua. Llevar al afectado en seguida a un hospital. Consultar a un médico.

En caso de contacto con los ojos

Lávese a fondo con agua abundante durante 15 minutos por lo menos y consulte al médico.

Por ingestión

Nunca debe administrarse nada por la boca a una persona inconsciente. Enjuague la boca con agua. Consultar a un médico.

4.2 Principales síntomas y efectos, agudos y retardados

Los síntomas y efectos más importantes conocidos se describen en la etiqueta (ver sección 2.2) y / o en la sección 11

4.3 Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente

Sin datos disponibles

SECCIÓN 5. Medidas de lucha contra incendios**5.1 Medios de extinción****Medios de extinción apropiados**

Usar agua pulverizada, espuma resistente al alcohol, polvo seco o dióxido de carbono.

5.2 Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla

Óxidos de carbono, Óxidos de azufre
Inflamable.

5.3 Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios

Si es necesario, usar equipo de respiración autónomo para la lucha contra el fuego.

5.4 Otros datos

Sin datos disponibles

SECCIÓN 6. Medidas en caso de vertido accidental**6.1 Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia**

Usar protección respiratoria. Evitar respirar los vapores, la neblina o el gas. Asegúrese una ventilación apropiada. Evacuar el personal a zonas seguras.
Equipo de protección individual, ver sección 8.

6.2 Precauciones relativas al medio ambiente

Impedir nuevos escapes o derrames si puede hacerse sin riesgos. No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado. La descarga en el ambiente debe ser evitada.

6.3 Métodos y material de contención y de limpieza

Empapar con material absorbente inerte y eliminar como un desecho especial. Guardar en contenedores apropiados y cerrados para su eliminación.

6.4 Referencia a otras secciones

Para eliminación de desechos ver sección 13.

SECCIÓN 7. Manipulación y almacenamiento

7.1 Precauciones para una manipulación segura

Evítese el contacto con los ojos y la piel. Evitar la inhalación de vapor o neblina. Ver precauciones en la sección 2.2

7.2 Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

Conservar el envase herméticamente cerrado en un lugar seco y bien ventilado. Los contenedores que se abren deben volverse a cerrar cuidadosamente y mantener en posición vertical para evitar pérdidas. Almacenar en un lugar fresco.

Temperatura de almacenaje recomendada 2 - 8 °C

7.3 Usos específicos finales

Aparte de los usos mencionados en la sección 1.2 no se estipulan otros usos específicos

SECCIÓN 8. Controles de exposición/protección individual

8.1 Parámetros de control

Componentes con valores límite ambientales de exposición profesional.

No contiene sustancias con valores límites de exposición profesional.

8.2 Controles de la exposición

Controles técnicos apropiados

Evitar el contacto con la piel, ojos y ropa. Lávense las manos antes de los descansos e inmediatamente después de manipular la sustancia.

Protección personal

Protección de los ojos/ la cara

Caretas de protección y gafas de seguridad. Use equipo de protección para los ojos probado y aprobado según las normas gubernamentales correspondientes, tales como NIOSH (EE.UU.) o EN 166 (UE).

Protección de la piel

Manipular con guantes. Los guantes deben ser inspeccionados antes de su uso. Utilice la técnica correcta de quitarse los guantes (sin tocar la superficie exterior del guante) para evitar el contacto de la piel con este producto. Deseche los guantes contaminados después de su uso, de conformidad con las leyes aplicables y buenas prácticas de laboratorio. Lavar y secar las manos.

Los guantes de protección seleccionados deben de cumplir con las especificaciones del Reglamento (UE) 2016/425 y de la norma EN 374 derivada del mismo.

Protección Corporal

Traje de protección completo contra productos químicos, El tipo de equipamiento de protección debe ser elegido según la concentración y la cantidad de sustancia peligrosa al lugar específico de trabajo.

Protección respiratoria

Donde el asesoramiento de riesgo muestre que los respiradores purificadores toda la cara con combinación multi-proposito (EEUU) o tipo ABEK (EN 14387 ingeniería. Si el respirador es la única protección, usar un respirador s Usar respiradores y componenets testados y aprobados bajo los estandards gubernamentales apropiados como NIOSH (EEUU) o CEN (UE)

Control de exposición ambiental

Impedir nuevos escapes o derrames si puede hacerse sin riesgos. No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado. La descarga en el ambiente debe ser evitada.

SECCIÓN 9. Propiedades físicas y químicas**9.1 Información sobre propiedades físicas y químicas básicas**

a) Aspecto	Forma: líquido Color: amarillo claro
b) Olor	Sin datos disponibles
c) Umbral olfativo	Sin datos disponibles
d) pH	Sin datos disponibles
e) Punto de fusión/ punto de congelación	Punto/intervalo de fusión: 10,5 °C
f) Punto inicial de ebullición e intervalo de ebullición	193 °C - lit.
g) Punto de inflamación	104 °C - copa cerrada
h) Tasa de evaporación	Sin datos disponibles
i) Inflamabilidad (sólido, gas)	Sin datos disponibles
j) Inflamabilidad superior/inferior o límites explosivos	Sin datos disponibles
k) Presión de vapor	10 mmHg a 90 °C
l) Densidad de vapor	Sin datos disponibles
m) Densidad relativa	1,331 gcm ³ a 25 °C
n) Solubilidad en agua	ligeramente soluble, soluble
o) Coeficiente de reparto n- octanol/agua	log Pow: 1,73
p) Temperatura de auto-inflamación	Sin datos disponibles
q) Temperatura de descomposición	Sin datos disponibles
r) Viscosidad	Sin datos disponibles
s) Propiedades explosivas	Sin datos disponibles
t) Propiedades comburentes	Sin datos disponibles

9.2 Otra información de seguridad

Sin datos disponibles

SECCIÓN 10. Estabilidad y reactividad

10.1 Reactividad

Sin datos disponibles

10.2 Estabilidad química

Estable bajo las condiciones de almacenamiento recomendadas.

10.3 Posibilidad de reacciones peligrosas

Sin datos disponibles

10.4 Condiciones que deben evitarse

Sin datos disponibles

10.5 Materiales incompatibles

Agentes oxidantes fuertes

10.6 Productos de descomposición peligrosos

Productos de descomposición peligrosos formados en condiciones de incendio. - Óxidos de carbono, Óxidos de azufre

Otros productos de descomposición peligrosos - Sin datos disponibles

En caso de incendio: véase sección 5

SECCIÓN 11. Información toxicológica

11.1 Información sobre los efectos toxicológicos

Toxicidad aguda

DL50 Oral - Rata - 615 mg/kg

DL50 Cutáneo - Rata - 894 mg/kg

Corrosión o irritación cutáneas

Sin datos disponibles

Lesiones o irritación ocular graves

Sin datos disponibles

Sensibilización respiratoria o cutánea

Sin datos disponibles

Mutagenicidad en células germinales

Sin datos disponibles

Carcinogenicidad

IARC: No se identifica ningún componente de este producto, que presente niveles mayores que o igual a 0,1% como agente carcinógeno humano probable, posible o confirmado por la (IARC) Agencia Internacional de Investigaciones sobre Carcinógenos.

Toxicidad para la reproducción

Sin datos disponibles

Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única

Sin datos disponibles

Toxicidad específica en determinados órganos - exposiciones repetidas

Sin datos disponibles

Peligro de aspiración

Sin datos disponibles

Información Adicional

RTECS: sin datos disponibles

Según nuestras informaciones, creemos que no se han investigado adecuadamente las propiedades químicas, físicas y toxicológicas.

SECCIÓN 12. Información ecológica**12.1 Toxicidad**

Toxicidad para los peces CL50 - Danio rerio (pez zebra) - 27,5 mg/l

Toxicidad para las dafnias y otros invertebrados acuáticos CE50 - Daphnia magna (Pulga de mar grande) - 22 mg/l - 48 h

12.2 Persistencia y degradabilidad

Biodegradabilidad Resultado: - Fácilmente biodegradable.

12.3 Potencial de bioacumulación

Sin datos disponibles

12.4 Movilidad en el suelo

Sin datos disponibles

12.5 Resultados de la valoración PBT y mPmB

Esta sustancia/mezcla no contiene componentes que se consideren que sean bioacumulativos y tóxicos persistentes (PBT) o muy bioacumulativos y muy persistentes (vPvB) a niveles del 0,1% o superiores.

12.6 Otros efectos adversos

Nocivo para los organismos acuáticos.
Sin datos disponibles

SECCIÓN 13. Consideraciones relativas a la eliminación**13.1 Métodos para el tratamiento de residuos****Producto**

Ofertar el sobrante y las soluciones no-aprovechables a una compañía de vertidos acreditada. Los residuos deben eliminarse de acuerdo con la directiva sobre residuos 2008/98/CE así como con otras normativas locales o nacionales. Deje los productos químicos en sus recipientes originales. No los mezcle con otros residuos. Maneje los recipientes sucios como el propio producto.

Envases contaminados

Eliminar como producto no usado.

SECCIÓN 14. Información relativa al transporte**14.1 Número ONU**

ADR/RID: 2810

IMDG: 2810

IATA: 2810

14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas

ADR/RID: LÍQUIDO TÓXICO, ORGÁNICO, N.E.P. (3,4-Ethylenedioxythiophene)

IMDG: TOXIC LIQUID, ORGANIC, N.O.S. (3,4-Ethylenedioxythiophene)

IATA: Toxic liquid, organic, n.o.s. (3,4-Ethylenedioxythiophene)

14.3 Clase(s) de peligro para el transporte

ADR/RID: 6.1

IMDG: 6.1

IATA: 6.1

14.4 Grupo de embalaje

ADR/RID: III

IMDG: III

IATA: III

14.5 Peligros para el medio ambiente

ADR/RID: no

IMDG Contaminante marino: no

IATA: no

14.6 Precauciones particulares para los usuarios

Sin datos disponibles

SECCIÓN 15. Información reglamentaria

15.1 Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla

La hoja técnica de seguridad cumple con los requisitos de la Reglamento (CE) No. 1907/2006.

REACH - Restricciones a la fabricación, comercialización y uso de determinadas sustancias, preparados y artículos peligrosos (Anexo XVII)

15.2 Evaluación de la seguridad química

Para este producto no se ha llevado a cabo una evaluación de la seguridad química

SECCIÓN 16. Otra información

Texto íntegro de las Declaraciones-H referidas en las secciones 2 y 3.

H302 Nocivo en caso de ingestión.
H311 Tóxico en contacto con la piel.
H319 Provoca irritación ocular grave.

Otros datos

Copyright 2018 Sigma-Aldrich Co. LLC. Se autoriza la reproducción en número ilimitado de copias para uso exclusivamente interno.

La información indicada arriba se considera correcta pero no pretende ser exhaustiva y deberá utilizarse únicamente como orientación. La información contenida en este documento esta basada en el presente estado de nuestro conocimiento y es aplicable a las precauciones de seguridad apropiadas para el producto. No representa ninguna garantía de las propiedades del producto. La Corporación Sigma-Aldrich y sus Compañías Afiliadas, no responderán por ningún daño resultante de la manipulación o contacto con el producto indicado arriba. Dirijase a www.sigma-aldrich.com y/o a los términos y condiciones de venta en el reverso de la factura o de la nota de entrega.


La marca que aparece en el encabezado y/o el pie de página de este documento puede no coincidir visualmente con el producto adquirido mientras hacemos la transición de nuestra marca. Sin embargo, toda la información del documento relativa al producto permanece sin cambios y coincide con el producto solicitado. Para más información, póngase en

A.7. Etanol [42].

ETANOL (ANHIDRO)	ICSC: 0044
Alcohol etílico Etanol absoluto Metilcarbinol Alcohol de cereales	Mayo 2018
CAS: 64-17-5	
Nº ONU: 1170	
CE: 200-578-6	

	PELIGROS	PREVENCIÓN	LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO Y EXPLOSIÓN	Altamente inflamable. Las mezclas vapor/aire son explosivas. Riesgo de incendio y explosión en contacto con sustancias incompatibles. Ver Peligros Químicos.	Evitar las llamas, NO producir chispas y NO fumar. Sistema cerrado, ventilación, equipo eléctrico y de alumbrado a prueba de explosión. NO utilizar aire comprimido para llenar, vaciar o manipular. NO poner en contacto con materiales incompatibles: ver Peligros Químicos.	Usar agua pulverizada, polvo, espuma resistente al alcohol, dióxido de carbono. En caso de incendio: mantener fríos los bidones y demás instalaciones rociando con agua.

¡HIGIENE ESTRICTA! ¡EVITAR LA FORMACIÓN DE NIEBLAS DEL PRODUCTO!			
	SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS
Inhalación	Tos. Dolor de cabeza. Fatiga. Somnolencia.	Usar ventilación, extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo.
Piel	Piel seca.	Traje de protección. Delantal. Guantes de protección.	Quitar las ropas contaminadas. Aclarar la piel con agua abundante o ducharse.
Ojos	Enrojecimiento. Dolor. Sensación de quemazón.	Utilizar gafas de protección de montura integral.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad), después proporcionar asistencia médica.
Ingestión	Sensación de quemazón. Dolor de cabeza. Confusión. Vértigo. Pérdida del conocimiento.	No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo.	Enjuagar la boca. Dar a beber uno o dos vasos de agua. Proporcionar asistencia médica inmediatamente.

DERRAMES Y FUGAS	CLASIFICACIÓN Y ETIQUETADO
Eliminar toda fuente de ignición. Ventilar. NO verterlo en el alcantarillado. Recoger, en la medida de lo posible, el líquido que se derrama y el ya derramado en recipientes tapados. Absorber el líquido residual en absorbente inerte. Eliminar el residuo con agua abundante. Almacenar y eliminar el residuo conforme a la normativa local.	<p>Conforme a los criterios del GHS de la ONU</p>  <p>PELIGRO</p> <p>Líquido y vapores muy inflamables Nocivo en caso de ingestión Provoca irritación ocular grave Puede provocar daños en los órganos tras exposiciones prolongadas o repetidas</p>
ALMACENAMIENTO	<p>Transporte Clasificación ONU Clase de Peligro ONU: 3; Grupo de Embalaje/Envase ONU: II</p>
A prueba de incendio. Separado de: ver Peligros Químicos.	
ENVASADO	



Organización
Internacional
del Trabajo



Organización
Mundial de la Salud

La información original ha sido preparada en inglés por un grupo internacional de expertos en nombre de la OIT y la OMS, con la asistencia financiera de la Comisión Europea.
© OIT y OMS 2018



European
Commission



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

ETANOL (ANHIDRO)		ICSC: 0044
INFORMACIÓN FÍSICO-QUÍMICA		
Estado físico; aspecto LÍQUIDO INCOLORO DE OLOR CARACTERÍSTICO.		Fórmula: $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH} / \text{C}_2\text{H}_6\text{O}$ Masa molecular: 46.1 Punto de ebullición: 78°C Punto de fusión: -114 °C Densidad relativa (agua = 1): 0.79 Solubilidad en agua: miscible Presión de vapor, kPa a 20°C: 5.8 Densidad relativa de vapor (aire = 1): 1.6 Densidad relativa de la mezcla vapor/aire a 20°C (aire = 1): 1.03 Punto de inflamación: 12.0 °C c.c. Temperatura de autoignición: 400°C Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 3.1-27.7 Coeficiente de reparto octanol/agua como log Pow: -0.32 Viscosidad: 1.074 mPa/s a 20°C
Peligros físicos El vapor se mezcla bien con el aire, formándose fácilmente mezclas explosivas.		
Peligros químicos Reacciona lentamente con hipoclorito de calcio, óxido de plata y amoníaco. Esto genera peligro de incendio y explosión. Reacciona violentamente con oxidantes fuertes tales como ácido nítrico, nitrato de plata, nitrato mercúrico y perclorato de magnesio. Esto genera peligro de incendio y explosión.		
EXPOSICIÓN Y EFECTOS SOBRE LA SALUD		
Vías de exposición La sustancia se puede absorber por inhalación del vapor y por ingestión.		Riesgo de inhalación La evaporación de esta sustancia a 20°C producirá bastante lentamente una concentración nociva de la misma en aire.
Efectos de exposición de corta duración La sustancia irrita gravemente los ojos. El vapor en concentraciones altas irrita los ojos y el tracto respiratorio. La sustancia puede afectar al sistema nervioso central.		Efectos de exposición prolongada o repetida La sustancia desengrasa la piel, lo que puede producir sequedad y agrietamiento. La sustancia puede afectar al tracto respiratorio superior y al sistema nervioso central. Esto puede dar lugar a irritación, dolor de cabeza, fatiga y falta de concentración. Ver Notas.
LÍMITES DE EXPOSICIÓN LABORAL		
TLV: 1000 ppm como STEL; A3 (cancerígeno animal). MAK: 380 mg/m ³ , 200 ppm; categoría de limitación de pico: II(4); cancerígeno: categoría 5; riesgo para el embarazo: grupo C; mutágeno: categoría 5		
MEDIO AMBIENTE		
Los efectos de esta sustancia sobre el medio ambiente han sido investigados adecuadamente, pero no se ha encontrado ninguno significativo.		
NOTAS		
El consumo de etanol durante el embarazo puede afectar al feto. La ingesta crónica de etanol puede causar cirrosis hepática y cáncer.		
INFORMACIÓN ADICIONAL		
- Límites de exposición profesional (INSST 2019): VLA-EC: 1000 ppm; 1910 mg/m ³ Notas: esta sustancia tiene prohibida total o parcialmente su comercialización y uso como fitosanitario y/o biocida. - N° de índice (clasificación y etiquetado armonizados conforme al Reglamento CLP de la UE): 603-002-00-5 - Clasificación UE		
 GOBIERNO DE ESPAÑA MINISTERIO DE TRABAJO, MIGRACIONES Y SEGURIDAD SOCIAL		La calidad y exactitud de la traducción o el posible uso que se haga de esta información no es responsabilidad de la OIT, la OMS ni la Comisión Europea. © Versión en español, INSST, 2018

A.8. Fosfato disódico [43]

HIDROGENOFOSFATO DE DISODIO	ICSC: 1129
Ortofosfato de disodio Fosfato dibásico de sodio	Abril 2006
CAS: 7558-79-4	
CE: 231-448-7	

	PELIGROS	PREVENCIÓN	LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO Y EXPLOSIÓN	No combustible. En caso de incendio se desprenden humos (o gases) tóxicos e irritantes.		En caso de incendio en el entorno: usar un medio de extinción adecuado.

	SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS
Inhalación	Tos. Dolor de garganta.	Usar ventilación.	Aire limpio, reposo.
Piel	Enrojecimiento. Dolor.	Guantes de protección.	Aclarar la piel con agua abundante o ducharse.
Ojos	Enrojecimiento. Dolor.	Utilizar gafas de protección de montura integral.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad), después proporcionar asistencia médica.
Ingestión	Dolor abdominal. Diarrea.	No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo.	Enjuagar la boca. Dar a beber uno o dos vasos de agua.

DERRAMES Y FUGAS	CLASIFICACIÓN Y ETIQUETADO
Protección personal: respirador con filtro para partículas adaptado a la concentración de la sustancia en aire. Barrer la sustancia derramada e introducirla en un recipiente tapado. Si fuera necesario, humedecer el polvo para evitar su dispersión.	Conforme a los criterios del GHS de la ONU
ALMACENAMIENTO	ATENCIÓN Provoca una leve irritación cutánea Provoca irritación ocular
Separado de ácidos fuertes.	Transporte Clasificación ONU
ENVASADO	



Organización
Internacional
del Trabajo



Organización
Mundial de la Salud

La información original ha sido preparada en inglés por un grupo internacional de expertos en nombre de la OIT y la OMS, con la asistencia financiera de la Comisión Europea.
© OIT y OMS 2018



European
Commission

HIDROGENOFOSFATO DE DISODIO		ICSC: 1129
INFORMACIÓN FÍSICO-QUÍMICA		
Estado físico; aspecto POLVO BLANCO O INCOLORO HIGROSCÓPICO O CRISTALES.		Fórmula: HO_4PNa_2 Masa molecular: 141.96 Se descompone a ~250°C Densidad: 0.5-1.2 g/cm³ Solubilidad en agua, g/100ml a 20°C: 7.7 Coeficiente de reparto octanol/agua como log Pow: -5.8 (calculado)
Peligros físicos		
Peligros químicos Se descompone por calentamiento. Esto produce humos tóxicos. Reacciona violentamente con ácidos fuertes.		
EXPOSICIÓN Y EFECTOS SOBRE LA SALUD		
Vías de exposición		Riesgo de inhalación Puede alcanzarse rápidamente una concentración nociva de partículas suspendidas en el aire cuando se dispersa.
Efectos de exposición de corta duración La sustancia irrita levemente los ojos, la piel y el tracto respiratorio.		Efectos de exposición prolongada o repetida
LÍMITES DE EXPOSICIÓN LABORAL		
MEDIO AMBIENTE		
NOTAS		
INFORMACIÓN ADICIONAL		
Clasificación UE		
 GOBIERNO DE ESPAÑA MINISTERIO DE TRABAJO, MIGRACIONES Y SEGURIDAD SOCIAL		 Instituto Nacional de Seguridad y Salud en el Trabajo La calidad y exactitud de la traducción o el posible uso que se haga de esta información no es responsabilidad de la OIT, la OMS ni la Comisión Europea. © Versión en español, INSST, 2018

A.9. Nitrógeno [44]

NITRÓGENO (gas comprimido)	ICSC: 1198 Marzo 1999
CAS: 7727-37-9 Nº ONU: 1066 CE: 231-783-9	

	PELIGROS	PREVENCIÓN	LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO Y EXPLOSIÓN	No combustible. El calentamiento intenso puede producir aumento de la presión con riesgo de estallido.		En caso de incendio en el entorno: usar un medio de extinción adecuado. En caso de incendio: mantener fría la botella rociando con agua.

	SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS
Inhalación	Pérdida del conocimiento. Debilidad. Asfixia. Ver Notas.	Usar ventilación.	Aire limpio, reposo. Puede ser necesaria respiración artificial. Proporcionar asistencia médica.
Piel			
Ojos			
Ingestión			

DERRAMES Y FUGAS	CLASIFICACIÓN Y ETIQUETADO
Ventilar. Protección personal: equipo autónomo de respiración.	Conforme a los criterios del GHS de la ONU Transporte Clasificación ONU Clase de Peligro ONU: 2.2
ALMACENAMIENTO	
A prueba de incendio, si está en local cerrado. Fresco. Mantener en lugar bien ventilado.	
ENVASADO	



Organización
Internacional
del Trabajo



Organización
Mundial de la Salud

La información original ha sido preparada en inglés por un grupo internacional de expertos en nombre de la OIT y la OMS, con la asistencia financiera de la Comisión Europea.
© OIT y OMS 2018



European
Commission

NITRÓGENO (gas comprimido)		ICSC: 1198
INFORMACIÓN FÍSICO-QUÍMICA		
Estado físico; aspecto GAS INODORO INCOLORO COMPRIMIDO.		Fórmula: N ₂ Masa molecular: 28.01 Punto de ebullición: -196°C Punto de fusión: -210°C Solubilidad en agua: escasa Densidad relativa de vapor (aire = 1): 0.97
Peligros físicos		
Peligros químicos		
EXPOSICIÓN Y EFECTOS SOBRE LA SALUD		
Vías de exposición La sustancia se puede absorber por inhalación.		Riesgo de inhalación Al producirse pérdidas en zonas confinadas, esta sustancia puede originar asfixia por disminución del contenido de oxígeno en el aire. Ver Notas.
Efectos de exposición de corta duración		Efectos de exposición prolongada o repetida
LÍMITES DE EXPOSICIÓN LABORAL		
MEDIO AMBIENTE		
NOTAS		
Altas concentraciones en el aire producen una deficiencia de oxígeno con riesgo de pérdida de conocimiento o muerte. Comprobar el contenido de oxígeno antes de entrar en la zona.		
INFORMACIÓN ADICIONAL		
- Límites de exposición profesional (INSHT 2012): Notas: asfixiante simple. - Clasificación UE		
 GOBIERNO DE ESPAÑA MINISTERIO DE TRABAJO, MIGRACIONES Y SEGURIDAD SOCIAL		 Instituto Nacional de Seguridad y Salud en el Trabajo La calidad y exactitud de la traducción o el posible uso que se haga de esta información no es responsabilidad de la OIT, la OMS ni la Comisión Europea. © Versión en español, INSST, 2018

A.10. N-metilpirrol [45]

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Fecha de revisión 31.07.2017

Versión 6.0

SECCIÓN 1. Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa

1.1 Identificador del producto

Artículo número 820832

Denominación 1-Metilpirrol para síntesis

Número de registro REACH No hay disponible un número de registro para esta sustancia, ya que la sustancia o su uso están exentos del registro; según el artículo 2 del Reglamento REACH (CE) núm. 1097/2006, el tonelaje anual no requiere registro o dicho registro está previsto para una fecha posterior.

No. CAS 96-54-8

1.2 Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados

Usos identificados Producto químico para síntesis
Para informaciones adicionales a usos refiérase al portal Merck Chemicals (www.merckgroup.com; for USA/Canada www.emdgroup.com).

1.3 Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad

Compañía Merck KGaA * 64271 Darmstadt * Alemania * Tel: +49 6151 72-0

Departamento Responsable LS-QHC * e-mail: prodsafe@merckgroup.com

1.4 Teléfono de emergencia Instituto Nacional de Toxicología * Madrid * Tel: 91 562 04 20

SECCIÓN 2. Identificación de los peligros

2.1 Clasificación de la sustancia o de la mezcla

Clasificación (REGLAMENTO (CE) No 1272/2008)

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número	820832
Nombre del producto	1-Metilpirrol para síntesis

Líquido inflamable, Categoría 2, H225

Toxicidad aguda, Categoría 4, Oral, H302

Irritación cutáneas, Categoría 2, H315

Para el texto integro de las Declaraciones-H mencionadas en esta sección, véase la Sección 16.

2.2 Elementos de la etiqueta

Etiquetado (REGLAMENTO (CE) No 1272/2008)

Pictogramas de peligro



Palabra de advertencia

Peligro

Indicaciones de peligro

H225 Líquido y vapores muy inflamables.

H302 Nocivo en caso de ingestión.

H315 Provoca irritación cutánea.

Consejos de prudencia

Prevención

P210 Mantener alejado del calor, de superficies calientes, de chispas, de llamas abiertas y de cualquier otra fuente de ignición. No fumar.

P240 Conectar a tierra/enlace equipotencial del recipiente y del equipo de recepción.

Intervención

P302 + P352 EN CASO DE CONTACTO CON LA PIEL: Lavar con agua y jabón abundantes.

Almacenamiento

P403 + P233 Almacenar en un lugar bien ventilado. Mantener el recipiente cerrado herméticamente.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número 820832
Nombre del producto 1-Metilpirrol para síntesis

Etiquetado reducido (≤ 125 ml)

Pictogramas de peligro



Palabra de advertencia

Peligro

Consejos de prudencia

P210 Mantener alejado del calor, de superficies calientes, de chispas, de llamas abiertas y de cualquier otra fuente de ignición. No fumar.

Contiene: 1-Methylpyrrole

No. CAS 96-54-8

2.3 Otros peligros

Ninguno conocido.

SECCIÓN 3. Composición/información sobre los componentes

3.1 Sustancia

Formula C_5H_7N (Hill)
No. CE 202-513-7
Masa molar 81,12 g/mol

Componentes peligrosos (REGLAMENTO (CE) No 1272/2008)

Nombre químico (Concentración)

No. CAS Número de registro Clasificación

1-Methylpyrrole (≤ 100 %)

96-54-8 *)

Líquido inflamable, Categoría 2, H225

Toxicidad aguda, Categoría 4, H302

Irritación cutánea, Categoría 2, H315

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número	820832
Nombre del producto	1-Metilpirrol para síntesis

*) No hay disponible un número de registro para esta sustancia, ya que la sustancia o su uso están exentos del registro; según el artículo 2 del Reglamento REACH (CE) núm. 1097/2006, el tonelaje anual no requiere registro o dicho registro está previsto para una fecha posterior.

Para el texto íntegro de las Declaraciones-H mencionadas en esta sección, véase la Sección 16.

3.2 Mezcla

No aplicable

SECCIÓN 4. Primeros auxilios

4.1 Descripción de los primeros auxilios

Tras inhalación: aire fresco.

En caso de contacto con la piel: Quitar inmediatamente todas las prendas contaminadas.

Aclararse la piel con agua/ ducharse.

Tras contacto con los ojos: aclarar con abundante agua. Retirar las lentillas.

Tras ingestión: cuidado con los vómitos. ¡Peligro de aspiración! Mantener libres las vías respiratorias. Posible obstrucción pulmonar tras aspiración del vómito. Llame inmediatamente al médico.

4.2 Principales síntomas y efectos, agudos y retardados

efectos irritantes, Náusea, Tos, Insuficiencia respiratoria, Vértigo, Vómitos

4.3 Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente

No hay información disponible.

SECCIÓN 5. Medidas de lucha contra incendios

5.1 Medios de extinción

Medios de extinción apropiados

Espuma, Dióxido de carbono (CO₂), Polvo seco

Medios de extinción no apropiados

No existen limitaciones de agentes extinguidores para esta sustancia/mezcla.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número	820832
Nombre del producto	1-Metilpirrol para síntesis

5.2 Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla

Inflamable.

Prestar atención al retorno de la llama.

Los vapores son más pesados que el aire y pueden expandirse a lo largo del suelo.

En caso de incendio posible formación de gases de combustión o vapores peligrosos.

Son posibles mezclas explosivas con el aire a temperaturas normales.

El fuego puede provocar emanaciones de:

óxidos de nitrógeno, gases nitrosos

5.3 Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios

Equipo de protección especial para el personal de lucha contra incendios

Permanencia en el área de riesgo sólo con sistemas de respiración artificiales e independientes del ambiente. Protección de la piel mediante observación de una distancia de seguridad y uso de ropa protectora adecuada .

Otros datos

Separar el recipiente de la zona de peligro y refrigerarlo con agua. Reprimir los gases/vapores/neblinas con agua pulverizada. Impedir la contaminación de las aguas superficiales o subterráneas por el agua que ha servido a la extinción de incendios.

SECCIÓN 6. Medidas en caso de vertido accidental

6.1 Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia

Indicaciones para el personal que no forma parte de los servicios de emergencia: No respirar los vapores, aerosoles. Evitar el contacto con la sustancia. Asegúrese una ventilación apropiada.

Manténgase alejado del calor y de las fuentes de ignición. Evacúe el área de peligro, respete los procedimientos de emergencia, consulte con expertos.

Consejos para el personal de emergencia:

Equipo protector véase sección 8.

6.2 Precauciones relativas al medio ambiente

No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado. Riesgo de explosión.

6.3 Métodos y material de contención y de limpieza

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número	820832
Nombre del producto	1-Metilpirrol para síntesis

Cubra las alcantarillas. Recoja, una y aspire los derrames. Observe posibles restricciones de materiales (véanse indicaciones en las secciones 7 o 10). Recoger con material absorbente de líquidos y neutralizante, p. ej. con Chemisorb® OH⁻ (art. Merck 101596). Proceder a la eliminación de los residuos. Aclarar.

6.4 Referencia a otras secciones

Para indicaciones sobre el tratamiento de residuos, véase sección 13.

SECCIÓN 7. Manipulación y almacenamiento

7.1 Precauciones para una manipulación segura

Consejos para una manipulación segura

Observar las indicaciones de la etiqueta.

Indicaciones para la protección contra incendio y explosión

Mantener apartado de las llamas abiertas, de las superficies calientes y de los focos de ignición. Tomar medidas de precaución contra descargas electrostáticas.

Medidas de higiene

Sustituir inmediatamente la ropa contaminada. Protección preventiva de la piel. Lavar cara y manos al término del trabajo.

7.2 Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

Condiciones de almacenamiento

Conservar el envase herméticamente cerrado en un lugar seco y bien ventilado. Manténgase alejado del calor y de las fuentes de ignición. Protejido de la luz.

Temperatura de almacenaje recomendada indicada en la etiqueta del producto.

7.3 Usos específicos finales

Fuera de los usos indicados en la sección 1.2 no se previenen aplicaciones finales adicionales.

SECCIÓN 8. Controles de exposición/protección individual

8.1 Parámetros de control



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número	820832
Nombre del producto	1-Metilpirrol para síntesis

No contiene sustancias con valores límites de exposición profesional.

8.2 Controles de la exposición

Medidas de ingeniería

Medidas técnicas y observación de métodos adecuados de trabajo tienen prioridad ante el uso de equipos de protección personal.

Véase sección 7.1.

Medidas de protección individual

Los tipos de auxiliares para protección del cuerpo deben elegirse específicamente según el puesto de trabajo en función de la concentración y cantidad de la sustancia peligrosa. Debería aclararse con el suministrador la estabilidad de los medios protectores frente a los productos químicos.

Protección de los ojos / la cara

Gafas de seguridad

Protección de las manos

Sumerción:

Material del guante:	goma butílica
Espesor del guante:	0,7 mm
tiempo de penetración:	> 480 min

Salpicaduras:

Material del guante:	Caucho nitrilo
Espesor del guante:	0,40 mm
tiempo de penetración:	> 10 min

Los guantes de protección indicados deben cumplir con las especificaciones de la Directiva 89/686/EEC y con su norma resultante EN374, por ejemplo KCL 898 Butoject® (Sumerción), KCL 730 Camatri® -Velours (Salpicaduras).

Los tiempos de ruptura mencionados anteriormente han sido determinados con muestras de material de los tipos de guantes recomendados en mediciones de laboratorio de KCL según EN374.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número	820832
Nombre del producto	1-Metilpirrol para síntesis

Esta recomendación solo es válida para el producto mencionado en la ficha de datos de seguridad, suministrado por nosotros y para el fin indicado. Al disolver o mezclar en otras sustancias y cuando las condiciones difieran de las indicadas en EN374, debe dirigirse al suministrador de guantes con distintivo CE (por ejem. KCL GmbH, D-36124 Eichenzell, Internet: www.kcl.de)

Otras medidas de protección

Vestimenta protectora antiestática retardante de la flama.

Protección respiratoria

necesaria en presencia de vapores/aerosoles.

Tipo de Filtro recomendado: Filtro A

El empresario debe garantizar que el mantenimiento, la limpieza y la prueba técnica de los protectores respiratorios se hagan según las instrucciones del productor de las mismas. Estas medidas deben ser documentadas debidamente.

Controles de exposición medioambiental

No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado.

Riesgo de explosión.

SECCIÓN 9. Propiedades físicas y químicas

9.1 Información sobre propiedades físicas y químicas básicas

Forma	líquido
Color	amarillo claro
Olor	aminado
Umbral olfativo	No hay información disponible.
pH	10,4 a 10 g/l 10 °C
Punto de fusión	-57 °C

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número	820832
Nombre del producto	1-Metilpirrol para síntesis
Punto /intervalo de ebullición	111 - 113 °C a 1.013 hPa
Punto de inflamación	16 °C Método: c.c.
Tasa de evaporación	No hay información disponible.
Inflamabilidad (sólido, gas)	No hay información disponible.
Límite de explosión, inferior	1,4 %(v)
Límite superior de explosividad	8,5 %(v)
Presión de vapor	No hay información disponible.
Densidad relativa del vapor	2,8
Densidad	0,91 g/cm ³ a 20 °C
Densidad relativa	No hay información disponible.
Solubilidad en agua	13 g/l a 20 °C
Coefficiente de reparto n-octanol/agua	log Pow: 1,21 (experimentalmente) (Literatura) No es de esperar una bioacumulación.
Temperatura de auto-inflamación	No hay información disponible.
Temperatura de descomposición	No hay información disponible.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número	820832
Nombre del producto	1-Metilpirrol para síntesis

Viscosidad, dinámica	0,7 mPa.s a 20 °C
----------------------	----------------------

Propiedades explosivas	No clasificado/a como explosivo/a.
------------------------	------------------------------------

Propiedades comburentes	ningún
-------------------------	--------

9.2 Otros datos

Temperatura de ignición	400 °C Método: DIN 51794
-------------------------	-----------------------------

SECCIÓN 10. Estabilidad y reactividad

10.1 Reactividad

Los vapores pueden formar una mezcla explosiva con el aire.

10.2 Estabilidad química

Sensibilidad a la luz

Sensible al aire.

10.3 Posibilidad de reacciones peligrosas

Reacción exotérmica con:

ácidos

Peligro de ignición o de formación de gases o vapores combustibles con:

Agentes oxidantes fuertes, compuestos favorecedores de incendios

10.4 Condiciones que deben evitarse

Calentamiento.

10.5 Materiales incompatibles

plásticos diversos

10.6 Productos de descomposición peligrosos

en caso de incendio: véase sección 5.

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número	820832
Nombre del producto	1-Metilpirrol para síntesis

SECCIÓN 11. Información toxicológica

11.1 Información sobre los efectos toxicológicos

Toxicidad oral aguda

DL50 Rata: 1.400 mg/kg

(Ficha de datos de Seguridad externa)

Síntomas: Existe riesgo de aspiración al vomitar., Aspiración puede causar edema pulmonar y neumonía.

Toxicidad aguda por inhalación

CL50 Rata: > 5,6 mg/l; 4 h ; polvo/niebla

(Ficha de datos de Seguridad externa)

Síntomas: Tos, Insuficiencia respiratoria, Su inhalación puede producir edemas en el tracto respiratorio.

Toxicidad cutánea aguda

Esta información no está disponible.

Irritación de la piel

Conejo

Resultado: Irritaciones

(Ficha de datos de Seguridad externa)

Provoca irritación cutánea.

Irritación ocular

Conejo

Resultado: No irrita los ojos

(Ficha de datos de Seguridad externa)

Sensibilización

Esta información no está disponible.

Mutagenicidad en células germinales

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número	820832
Nombre del producto	1-Metilpirrol para síntesis

Genotoxicidad in vitro

Prueba de Ames

Resultado: negativo

(Literatura)

Carcinogenicidad

Esta información no está disponible.

Toxicidad para la reproducción

Esta información no está disponible.

Teratogenicidad

Esta información no está disponible.

Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única

Esta información no está disponible.

Toxicidad específica en determinados órganos - exposiciones repetidas

Esta información no está disponible.

Peligro de aspiración

Esta información no está disponible.

11.2 Otros datos

Tras absorción:

Náusea, Vértigo, Vómitos

Las otras propiedades peligrosas no pueden ser excluidas.

Manipular con las precauciones de higiene industrial adecuadas, y respetar las prácticas de seguridad.

SECCIÓN 12. Información ecológica

12.1 Toxicidad

Toxicidad para los peces

CL50 *Leuciscus idus* (Carpa dorada): 530 mg/l; 96 h

(Ficha de datos de Seguridad externa)

12.2 Persistencia y degradabilidad



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo al Reglamento (CE) No. 1907/2006

Artículo número	820832
Nombre del producto	1-Metilpirrol para síntesis

Biodegradabilidad

43 %; 28 d; aeróbico Demanda bioquímica de oxígeno
(Literatura)

12.3 Potencial de bioacumulación

Coefficiente de reparto n-octanol/agua

log Pow: 1,21
(experimentalmente)

(Literatura) No es de esperar una bioacumulación.

12.4 Movilidad en el suelo

No hay información disponible.

12.5 Resultados de la valoración PBT y mPmB

Una valoración PBT y MPMB no se hizo, debido al hecho de que una evaluación de peligro químico no es necesaria o no existe.

12.6 Otros efectos adversos

La descarga en el ambiente debe ser evitada.

A.11. Perclorato de litio [46]



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Versión 6.0
Fecha de revisión 29.10.2019
Fecha de impresión 15.01.2020

SECCIÓN 1. Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa

1.1 Identificadores del producto

Nombre del producto : Perclorato de litio

Referencia : 431567

Marca : Aldrich

REACH No. : Un número de registro no está disponible para esta sustancia, ya que la sustancia o sus usos están exentos del registro, el tonelaje anual no requiere registro o dicho registro está previsto para una fecha posterior

No. CAS : 7791-03-9

1.2 Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados

Usos identificados : Reactivos para laboratorio, Fabricación de sustancias

1.3 Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad

Compañía : Merck Life Science S.L.
Calle Maria de Molina 40
E-28006 MADRID

Teléfono : +34 916 619 977

Fax : +34 916 619 642

E-mail de contacto : serviciotecnico@merckgroup.com

1.4 Teléfono de emergencia

Teléfono de Urgencia : 900-868538 (CHEMTREC España)
+(34)-931768545 (CHEMTREC internacional)

SECCIÓN 2. Identificación de los peligros

2.1 Clasificación de la sustancia o de la mezcla

Clasificación de acuerdo con el Reglamento (CE) 1272/2008

Sólidos comburentes (Categoría 2), H272

Irritación cutáneas (Categoría 2), H315

Irritación ocular (Categoría 2), H319

Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única (Categoría 3), H335

Para el texto integro de las Declaraciones-H mencionadas en esta sección, véase la Sección 16.

2.2 Elementos de la etiqueta

Etiquetado de acuerdo con el Reglamento (CE) 1272/2008



Pictograma



Palabra de advertencia Peligro

Indicación(es) de peligro

H272 Puede agravar un incendio; comburente.

H315 Provoca irritación cutánea.

H319 Provoca irritación ocular grave.

H335 Puede irritar las vías respiratorias.

Declaración(es) de prudencia

P220 Mantener o almacenar alejado de la ropa/materiales combustibles.

P261 Evitar respirar el polvo.

P305 + P351 + P338 EN CASO DE CONTACTO CON LOS OJOS: Enjuagar con agua cuidadosamente durante varios minutos. Quitar las lentes de contacto cuando estén presentes y pueda hacerse con facilidad. Proseguir con el lavado.

Declaración Suplementaria ninguno(a)
del Peligro

2.3 Otros Peligros

Esta sustancia/mezcla no contiene componentes que se consideren que sean bioacumulativos y tóxicos persistentes (PBT) o muy bioacumulativos y muy persistentes (vPvB) a niveles del 0,1% o superiores.

SECCIÓN 3. Composición/información sobre los componentes

3.1 Sustancias

Formula : ClLiO_4
 Peso molecular : 106,39 g/mol
 No. CAS : 7791-03-9
 No. CE : 232-237-2

Componente	Clasificación	Concentración
Lithium perchlorate		
	Ox. Sol. 2; Acute Tox. 4; Skin Irrit. 2; Eye Irrit. 2; STOT SE 3; H272, H302, H315, H319, H335	<= 100 %

Para el texto integro de las Declaraciones-H mencionadas en esta sección, véase la Sección 16.

SECCIÓN 4. Primeros auxilios

4.1 Descripción de los primeros auxilios

Recomendaciones generales

Consultar a un médico. Mostrar esta ficha de seguridad al doctor que esté de servicio.

Si es inhalado

Si aspiró, mueva la persona al aire fresco. Si ha parado de respirar, hacer la respiración artificial. Consultar a un médico.

En caso de contacto con la piel

Eliminar lavando con jabón y mucha agua. Consultar a un médico.

En caso de contacto con los ojos

Lávese a fondo con agua abundante durante 15 minutos por lo menos y consulte al médico.

Por ingestión

Nunca debe administrarse nada por la boca a una persona inconsciente. Enjuague la boca con agua. Consultar a un médico.

4.2 Principales síntomas y efectos, agudos y retardados

Los síntomas y efectos más importantes conocidos se describen en la etiqueta (ver sección 2.2) y / o en la sección 11

4.3 Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente

Sin datos disponibles

SECCIÓN 5. Medidas de lucha contra incendios

5.1 Medios de extinción

Medios de extinción apropiados

Usar agua pulverizada, espuma resistente al alcohol, polvo seco o dióxido de carbono.

5.2 Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla

Gas cloruro de hidrógeno, Óxidos de litio.

5.3 Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios

Si es necesario, usar equipo de respiración autónomo para la lucha contra el fuego.

5.4 Otros datos

El agua pulverizada puede ser utilizada para enfriar los contenedores cerrados.

SECCIÓN 6. Medidas en caso de vertido accidental

6.1 Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia

Utilícese equipo de protección individual. Evite la formación de polvo. Evitar respirar los vapores, la neblina o el gas. Asegúrese una ventilación apropiada. Evacuar el personal a zonas seguras. Evitar respirar el polvo. Equipo de protección individual, ver sección 8.

6.2 Precauciones relativas al medio ambiente

No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado.

6.3 Métodos y material de contención y de limpieza

Limpiar y traspalar. Contener y recoger el derrame con un aspirador aislado de la electricidad o cepillándolo, y meterlo en un envase para su eliminación de acuerdo con las reglamentaciones locales (ver sección 13). Guardar en contenedores apropiados y cerrados para su eliminación.

6.4 Referencia a otras secciones

Para eliminación de desechos ver sección 13.

SECCIÓN 7. Manipulación y almacenamiento

7.1 Precauciones para una manipulación segura

Evítese el contacto con los ojos y la piel. Evítese la formación de polvo y aerosoles.

Debe disponer de extracción adecuada en aquellos lugares en los que se forma polvo. Conservar alejado de toda llama o fuente de chispas - No fumar. Manténgase alejado del calor y de las fuentes de ignición.
Ver precauciones en la sección 2.2

7.2 Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

Almacenar en un lugar fresco. Conservar el envase herméticamente cerrado en un lugar seco y bien ventilado.

Higroscópico.

7.3 Usos específicos finales

Aparte de los usos mencionados en la sección 1.2 no se estipulan otros usos específicos

SECCIÓN 8. Controles de exposición/protección individual

8.1 Parámetros de control

Componentes con valores límite ambientales de exposición profesional.

No contiene sustancias con valores límites de exposición profesional.

8.2 Controles de la exposición

Controles técnicos apropiados

Manipular con las precauciones de higiene industrial adecuadas, y respetar las prácticas de seguridad. Lávense las manos antes de los descansos y después de terminar la jornada laboral.

Protección personal

Protección de los ojos/ la cara

Gafas de seguridad con protecciones laterales conformes con la EN166 Use equipo de protección para los ojos probado y aprobado según las normas gubernamentales correspondientes, tales como NIOSH (EE.UU.) o EN 166 (UE).

Protección de la piel

Manipular con guantes. Los guantes deben ser inspeccionados antes de su uso. Utilice la técnica correcta de quitarse los guantes (sin tocar la superficie exterior del guante) para evitar el contacto de la piel con este producto. Deseche los guantes contaminados después de su uso, de conformidad con las leyes aplicables y buenas prácticas de laboratorio. Lavar y secar las manos.

Los guantes de protección seleccionados deben de cumplir con las especificaciones del Reglamento (UE) 2016/425 y de la norma EN 374 derivada del mismo.

Sumerción

Material: Caucho nitrilo

espesura mínima de capa: 0,11 mm

Tiempo de penetración: 480 min

Material probado: Dermatrill® (KCL 740 / Aldrich Z677272, Talla M)

Salpicaduras

Material: Caucho nitrilo

espesura mínima de capa: 0,11 mm

Tiempo de penetración: 480 min

Material probado: Dermatrill® (KCL 740 / Aldrich Z677272, Talla M)

origen de datos: KCL GmbH, D-36124 Eichenzell, Teléfono +49 (0)6659 87300, e-mail sales@kcl.de, Método de prueba: EN374

Si es utilizado en solución, o mezclado con otras sustancias, y bajo condiciones diferentes de la EN 374, ponerse en contacto con el proveedor de los guantes

aprobados CE. Esta recomendación es meramente aconsejable y deberá ser evaluada por un responsable de seguridad e higiene industrial familiarizado con la situación específica de uso previsto por nuestros clientes. No debe interpretarse como una aprobación de oferta para cualquier escenario de uso específico.

Protección Corporal

Indumentaria impermeable, El tipo de equipamiento de protección debe ser elegido según la concentración y la cantidad de sustancia peligrosa al lugar específico de trabajo.

Protección respiratoria

Donde el asesoramiento de riesgo muestre que los respiradores purificadores toda la cara tipo N100 (EEUU) o tipo P3 (EN 143) y cartuchos de respuesta única protección, usar un respirador suministrado que cubra toda la cara Usar respiradores y componentes testados y aprobados bajo los estándares gubernamentales apropiados como NIOSH (EEUU) o CEN (UE)

Control de exposición ambiental

No dejar que el producto entre en el sistema de alcantarillado.

SECCIÓN 9. Propiedades físicas y químicas

9.1 Información sobre propiedades físicas y químicas básicas

a) Aspecto	Forma: granulado Color: blanco
b) Olor	Sin datos disponibles
c) Umbral olfativo	Sin datos disponibles
d) pH	6,0 - 9,5 a 106,4 g/l a 25 °C
e) Punto de fusión/ punto de congelación	Punto/intervalo de fusión: 236 °C - lit.
f) Punto inicial de ebullición e intervalo de ebullición	Sin datos disponibles
g) Punto de inflamación	No aplicable
h) Tasa de evaporación	Sin datos disponibles
i) Inflamabilidad (sólido, gas)	Sin datos disponibles
j) Inflamabilidad superior/inferior o límites explosivos	Sin datos disponibles
k) Presión de vapor	Sin datos disponibles
l) Densidad de vapor	Sin datos disponibles
m) Densidad relativa	2,420 g/cm ³
n) Solubilidad en agua	aprox.106,4 g/l a 20 °C
o) Coeficiente de reparto n- octanol/agua	Sin datos disponibles
p) Temperatura de	Sin datos disponibles

auto-inflamación

- | | |
|----------------------------------|-----------------------|
| q) Temperatura de descomposición | Sin datos disponibles |
| r) Viscosidad | Sin datos disponibles |
| s) Propiedades explosivas | Sin datos disponibles |
| t) Propiedades comburentes | Sin datos disponibles |

9.2 Otra información de seguridad

Sin datos disponibles

SECCIÓN 10. Estabilidad y reactividad

10.1 Reactividad

Sin datos disponibles

10.2 Estabilidad química

Estable bajo las condiciones de almacenamiento recomendadas.

10.3 Posibilidad de reacciones peligrosas

Sin datos disponibles

10.4 Condiciones que deben evitarse

Evitar la humedad.

10.5 Materiales incompatibles

Materiales orgánicos, Metales en polvo

10.6 Productos de descomposición peligrosos

Productos de descomposición peligrosos formados en condiciones de incendio. - Gas cloruro de hidrógeno, Óxidos de litio.

Otros productos de descomposición peligrosos - Sin datos disponibles

En caso de incendio: véase sección 5

SECCIÓN 11. Información toxicológica

11.1 Información sobre los efectos toxicológicos

Toxicidad aguda

Corrosión o irritación cutáneas

Lesiones o irritación ocular graves

Sensibilización respiratoria o cutánea

Mutagenicidad en células germinales

Carcinogenicidad

IARC: No se identifica ningún componente de este producto, que presente niveles mayores que o igual a 0,1% como agente carcinógeno humano probable, posible o confirmado por la (IARC) Agencia Internacional de Investigaciones sobre Carcinógenos.

Toxicidad para la reproducción

Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única

Puede irritar las vías respiratorias.

Toxicidad aguda por inhalación - Irritaciones en las vías respiratorias.

Toxicidad específica en determinados órganos - exposiciones repetidas

Peligro de aspiración

Información Adicional

RTECS: sin datos disponibles

En dosis elevadas, el ion litio puede provocar mareos y postración, así como lesiones renales si se limita la aportación de sodio. Se han descrito casos de deshidratación, pérdida de peso, efectos dermatológicos y trastornos tiroideos. Entre los efectos sobre el sistema nervioso central pueden presentarse lenguaje escandido, visión borrosa, disminución de la función sensorial, ataxia y convulsiones. La exposición repetida al ion litio puede provocar diarrea, vómitos y efectos neuromusculares como temblores, clonus y reflejos hiperactivos. Según nuestras informaciones, creemos que no se han investigado adecuadamente las propiedades químicas, físicas y toxicológicas.

Para compuestos de litio en general: tras absorción por manejo inadecuado de grandes cantidades, afecciones del sistema nervioso central, ansiedad, espasmos, ataxia (problemas de coordinación motriz) por desequilibrio electrolítico.

Las otras propiedades peligrosas no pueden ser excluidas.

Manipular con las precauciones de higiene industrial adecuadas, y respetar las prácticas de seguridad.

SECCIÓN 12. Información ecológica

12.1 Toxicidad

Toxicidad para los peces	CL50 - <i>Leuciscus idus</i> (Carpa dorada) - 1.850 mg/l - 48 h Observaciones: (referido al anión)
Toxicidad para las dafnias y otros invertebrados acuáticos	CE50 - <i>Daphnia magna</i> (Pulga de mar grande) - 1.077 mg/l - 24 h Observaciones: (referido al anión)
Toxicidad para las algas	IC5 - <i>M. aeruginosa</i> - 79 mg/l - 8 d Observaciones: (referido al anión) IC5 - <i>Scenedesmus quadricauda</i> (alga verde) - 360 mg/l - 7 d Observaciones: (referido al anión)

12.2 Persistencia y degradabilidad

12.3 Potencial de bioacumulación

12.4 Movilidad en el suelo

12.5 Resultados de la valoración PBT y mPmB

Esta sustancia/mezcla no contiene componentes que se consideren que sean bioacumulativos y tóxicos persistentes (PBT) o muy bioacumulativos y muy persistentes (vPvB) a niveles del 0,1% o superiores.

12.6 Otros efectos adversos

Información complementaria sobre la ecología

No se puede excluir un peligro para el medio ambiente en el caso de una manipulación o eliminación no profesional.

La descarga en el ambiente debe ser evitada.

SECCIÓN 13. Consideraciones relativas a la eliminación
13.1 Métodos para el tratamiento de residuos**Producto**

Quemar en un incinerador apto para productos químicos provisto de postquemador y lavador, procediendo con gran cuidado en la ignición ya que este producto es extremadamente inflamable. Ofertar el sobrante y las soluciones no-aprovechables a una compañía de vertidos acreditada.

Envases contaminados

Eliminar como producto no usado.

SECCIÓN 14. Información relativa al transporte
14.1 Número ONU

ADR/RID: 1481

IMDG: 1481

IATA: 1481

14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas

ADR/RID: PERCLORATOS INORGÁNICOS, N.E.P.

IMDG: PERCHLORATES, INORGANIC, N.O.S.

IATA: Perchlorates, inorganic, n.o.s.

14.3 Clase(s) de peligro para el transporte

ADR/RID: 5.1

IMDG: 5.1

IATA: 5.1

14.4 Grupo de embalaje

ADR/RID: II

IMDG: II

IATA: II

14.5 Peligros para el medio ambiente

ADR/RID: no

IMDG Contaminante marino: no

IATA: no

14.6 Precauciones particulares para los usuarios

Sin datos disponibles

SECCIÓN 15. Información reglamentaria
15.1 Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla

La hoja técnica de seguridad cumple con los requisitos de la Reglamento (CE) No. 1907/2006.

15.2 Evaluación de la seguridad química

Para este producto no se ha llevado a cabo una evaluación de la seguridad química

SECCIÓN 16. Otra información
Texto íntegro de las Declaraciones-H referidas en las secciones 2 y 3.

H272	Puede agravar un incendio; comburente.
H302	Nocivo en caso de ingestión.
H315	Provoca irritación cutánea.
H319	Provoca irritación ocular grave.

Aldrich- 431567

Pagina 8 de 9

H335 Puede irritar las vías respiratorias.

Otros datos

Copyright 2018 Sigma-Aldrich Co. LLC. Se autoriza la reproducción en número ilimitado de copias para uso exclusivamente interno.

La información indicada arriba se considera correcta pero no pretende ser exhaustiva y deberá utilizarse únicamente como orientación. La información contenida en este documento esta basada en el presente estado de nuestro conocimiento y es aplicable a las precauciones de seguridad apropiadas para el producto. No representa ninguna garantía de las propiedades del producto. La Corporación Sigma-Aldrich y sus Compañías Afiliadas, no responderán por ningún daño resultante de la manipulación o contacto con el producto indicado arriba. Dirijase a www.sigma-aldrich.com y/o a los términos y condiciones de venta en el reverso de la factura o de la nota de entrega.

La marca que aparece en el encabezado y/o el pie de página de este documento puede no coincidir visualmente con el producto adquirido mientras hacemos la transición de nuestra marca. Sin embargo, toda la información del documento relativa al producto permanece sin cambios y coincide con el producto solicitado. Para más información, póngase en contacto con mlsbranding@sial.com